



Titre: Inversion gravimétrique tridimensionnelle utilisant un modèle de
Title: covariance des paramètres

Auteur: Pierrick Chasseriau
Author:

Date: 2003

Type: Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis

Référence: Chasseriau, P. (2003). Inversion gravimétrique tridimensionnelle utilisant un
Citation: modèle de covariance des paramètres [Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. <https://publications.polymtl.ca/7112/>

 **Document en libre accès dans PolyPublie**
Open Access document in PolyPublie

URL de PolyPublie: <https://publications.polymtl.ca/7112/>
PolyPublie URL:

**Directeurs de
recherche:**
Advisors:

Programme: Non spécifié
Program:

In compliance with the
Canadian Privacy Legislation
some supporting forms
may have been removed from
this dissertation.

While these forms may be included
in the document page count,
their removal does not represent
any loss of content from the dissertation.

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

INVERSION GRAVIMÉTRIQUE TRIDIMENSIONNELLE UTILISANT UN MODÈLE
DE COVARIANCE DES PARAMÈTRES

PIERRICK CHASSERIAU

DÉPARTEMENT DES GÉNIES CIVIL, GÉOLOGIQUES ET DES MINES
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

MÉMOIRE PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE MAÎTRISE ÈS SCIENCES APPLIQUÉES
(GÉNIE MINÉRAL)

MARS 2003



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Acquisitions and
Bibliographic Services

Acquisitions et
services bibliographiques

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence

ISBN: 0-612-86389-1

Our file Notre référence

ISBN: 0-612-86389-1

The author has granted a non-exclusive licence allowing the National Library of Canada to reproduce, loan, distribute or sell copies of this thesis in microform, paper or electronic formats.

L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque nationale du Canada de reproduire, prêter, distribuer ou vendre des copies de cette thèse sous la forme de microfiche/film, de reproduction sur papier ou sur format électronique.

The author retains ownership of the copyright in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Ce mémoire intitulé:

INVERSION GRAVIMÉTRIQUE TRIDIMENSIONNELLE UTILISANT UN MODÈLE
DE COVARIANCE DES PARAMÈTRES

présenté par: CHASSERIAU Pierrick

en vue de l'obtention du diplôme de: Maîtrise ès science appliquées

a été dûment accepté par le jury d'examen constitué de:

M. MARCOTTE Denis, Ph.D., président

M. CHOUTEAU Michel, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. KEATING Pierre, Ph.D., membre

A Claudia

A Zachary

A mes parents

Remerciements

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon directeur de recherche, Michel Chouteau, pour ses conseils tout au long de ce travail mais aussi pour m'avoir permis de traverser l'Atlantique et pour son ouverture sur le monde de la géophysique.

J'exprimerais également ma reconnaissance envers mes "compagnons d'inversion", Mustapha Asli et Olivier Boulanger. Ce fut très enrichissant d'être à leur côté et de pouvoir discuter des méthodes d'inversion, des problèmes rencontrés et des moyens de les résoudre.

Je voudrais remercier toutes les personnes que j'ai côtoyées durant ces années : Alberto, Bernard, Benoit, Circé, Erwan, Gilles, Gustavo, Maria, Kazuko, Klaus, Mihi, Stefi. Tous, à leur façon, ont contribué à rendre chaleureux notre lieu de travail.

Enfin, je tiens à remercier La Chaire de Géophysique Appliquée, qui, par sa contribution financière m'a permis de réaliser ce projet de maîtrise.

Résumé

Pour des raisons théoriques et algébriques, l'inversion gravimétrique tri-dimensionnelle produit malheureusement une infinité de solutions de distribution de densité pour une anomalie donnée. Beaucoup de travaux sont portés pour limiter cette ambiguïté, notamment, en ajoutant des contraintes pour diminuer le nombre de solutions possibles et pour que celles-ci soient les plus réalistes possible. La méthode d'inversion présentée dans ce mémoire incorpore des contraintes telles que l'ajustement des données pondéré par la covariance des erreurs sur les données, l'ajustement d'un modèle pondéré par la covariance des paramètres, la pondération des paramètres en fonction de leur profondeur ainsi que l'ajout de données et/ou de densités en trou de forage. L'ajustement d'un modèle pondéré par la covariance des paramètres permet la reconstruction de corps anisotropiques tel qu'un dyke. Ces covariances peuvent être déterminées de façon à priori par la connaissance de la géologie du site étudié ou expérimentalement par l'utilisation de variogrammes. Les variogrammes se calculent dans l'espace 3D des paramètres et sont ajustés par des modèles de variogrammes qui serviront à établir un modèle de covariance. La sensibilité du champs de pesanteur en un point diminuant très vite avec la distance en ce point, une série d'observations prise en surface aura tendance à générer une distribution inopportune de densité proche de la surface. La pondération des cellules en fonction de leur profondeur est alors nécessaire dans le sens où les densités des cellules profondes gardent une influence sur les mesures en surface. L'apport des

données de forages permet de mieux localiser les corps spatialement et, dans le cas où les forages sont proches des corps, de mieux restituer leur contraste de densité. Dans le cas où l'on utilise des données de gravité en forage, on n'utilise pas de pondération en fonction de la profondeur des cellules, mais plutôt une norme des fonctions de noyau. Ainsi, on donne plus de poids aux cellules éloignées des points de mesure. En outre, l'algorithme permet de fixer des valeurs de densité, connues soit par des échantillons de roches en surface, soit par des données diagaphiques mesurées en forages. Ces mêmes densités peuvent servir à évaluer le modèle spatial des covariances. On peut également employer une contrainte de positivité sur la distribution de densités. Des données de gravimétrie et de densités dans la région de Rouyn-Noranda en Abitibi ont permis une interprétation des structures principales du Groupe de Blake River sur une profondeur de 10 kilomètres. Cette interprétation a pu faire l'objet d'une comparaison avec d'autres méthodes d'inversion et de modélisation employées sur la même région. Une autre étude plus fine a pu être faite dans la région autour des deux forages AN-51 et AN-67 du gisement d'Ancyl. Ces forages ont fourni des mesures de densités jusqu'à une profondeur de 1600 mètres. Une interprétation a pu être établie sur une profondeur de 2 kilomètres. Du fait de la plus petite taille des blocs, on a pu fixer aux blocs de surface et aux blocs adjacents des forages des valeurs moyennes des densités. Dans ce cas, on a pu comparer les résultats avec les résultats d'une inversion faite sans valeurs de densités fixées.

Abstract

For theoretical and algebraic reasons, an infinity of density distribution can be computed by a 3D gravity inversion for a given anomaly. Many works were carried out to limit this ambiguity : some constraints can be added to restrain the number of solution and getting them more realistic. The inversion method presented incorporates some constraints like misfit data weighted by covariance of data errors, a model norm weighted by covariance parameters, depth-weighting solution and borehole data (densities and/or gravity). The minimization of the model weighted by the covariance parameters allows reconstruction of anisotropic shapes such a dyke. These covariances can be either determined a priori by knowledge of the geology or experimentally by use of experimental variograms. The variograms are computed in the 3D parameters space and modelised to construct a covariance model. Because the sensibility of the gravity field decays quickly with the distance, surface gravity data will generate a shallow densities distribution. The depth-weighting is then necessary to counteract this. Borehole gravity data enable to improve the location and the density contrast of the bodies, as well as boreholes are not too far from the bodies. In this case, we don't use a depth weighting function but a normative function of the Kernel's functions. It gives more weight to cells far from data. Moreover, the algorithm enables to freeze some density values, known by outcrops samples or well logging data, which are used for finding parameters covariance in spatial directions. One can also employ a density positivity constraint when needed. A field example

inversion of a gravity data localized in the region of Rouyn-Noranda (Abitibi) is made for an interpretation of the main structures of the Blake River Group until a depth of 10 kilometers. This interpretation can be compared with others methods of inversion and modelisation in the same region. A more detailed inversion using AN-57 and AN-67 boreholes data is done. This boreholes provide density data until a depth of 1600 meters. The interpretation is made until 2 kilometers of depth. We can freeze surface densities values and densities blocks bordering boreholes. We can compare this result with an inversion without fixed densities.

Table des matières

DÉDICACE	iv
REMERCIEMENTS	v
RÉSUMÉ	vi
ABSTRACT	viii
TABLE DES MATIÈRES	x
LISTE DES FIGURES	xiii
LISTE DES ANNEXES	xviii
LISTE DES SIGLES ET ABRÉVIATIONS	xix
CHAPITRE 1 : INTRODUCTION	1
1.1 Méthodes d'interprétation en gravimétrie	1
1.2 Développements mathématiques	2
1.3 Inversion gravimétrique 3D utilisant la covariance des paramètres	6
CHAPITRE 2 : LE VARIOGRAMME COMME OUTIL DE CAL- CUL DE LA MATRICE DE COVARIANCE DES PARAMÈTRES	11

2.1	Théorie des variogrammes	11
2.2	Modélisation	13
2.3	Résultats	14
2.4	Méthode de calcul du modèle de covariance	20

CHAPITRE 3 : 3D GRAVITY INVERSION USING A MODEL OF PARAMETER COVARIANCE 23

3.1	abstract	23
3.2	Introduction	24
3.3	Methodology	26
3.4	Covariance model calculation	30
3.5	Application to synthetic data	34
3.5.1	Dipping Dyke	34
3.5.2	Horizontal plate	43
3.6	Field example	47
3.7	Discussion and conclusion	60
3.8	Acknowledgments	61
3.9	Appendix	61
3.10	References	62

CHAPITRE 4 : DISCUSSION 66

4.1	à propos de forages	66
4.2	à propos de bruit	73
4.3	à propos de covariance	75
4.4	à propos de modèle initial	82

CONCLUSIONS 84

RÉFÉRENCES	86
----------------------	----

ANNEXES	91
-------------------	----

Liste des figures

1.1	Loi de l'attraction universelle (Newton)	2
1.2	Composante verticale du champs gravitationnel due à l'attraction d'un prisme élémentaire dense	3
2.1	Exemple de modèle de variogramme de type gaussien	13
2.2	Modèle de corps anisotropique (9x7x5 mètres) et les variogrammes calculés dans les trois directions spatiales	16
2.3	Modèle de corps anisotrope (11x3x3 mètres) et les variogrammes as- sociés	19
2.4	Exemple de matrice de covariance	22
3.1	(a) Prismatic model having a density contrast $\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$. (b), (c) and (d) Directional variograms of density distribution in the x, y and z directions respectively. Gaussian models of variogram (dashed line) are drawn by fitting the experimental values (circles). Covario- grams are drawn in dash-dotted line.	32
3.2	(a) Model of dipping dyke ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) in homogeneous back- ground; (b) surface modelled data.	35

- 3.3 Variograms and covariograms for the dyke model. The experimental variograms fit an exponential model variogram. The range is 700 meters in the dyke direction (a), dipping 45° . In direction perpendicular to the dyke (b) and in the y axis direction (c), the range are respectively 200 and 250 meters 37
- 3.4 Dipping dyke : results of inversion using (a) $C_p = I$, and (b) using experimental C_p . Synthetic dyke is represented in solid white line. . . 40
- 3.5 Variograms and covariograms of the density data obtained in figure 3.4b. The experimental variograms fit a gaussian model variogram. The range is 660 meters in the dyke direction (a), dipping 45° . In direction perpendicular to the dyke (b) and in the y axis direction (c), the range are respectively 450 and 500 meters 41
- 3.6 Dipping dyke : results of inversion using wrong initial model far from the ideal model. The section shown is along $Y=550$ meters. The ideal model ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) is drawn in solid white line and the initial model used ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) is a shallow cube drawn in solid black line in the right upper corner 42
- 3.7 (a) Model of horizontal plate ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$). (b) Synthetic gravity data along one of the boreholes (drawn in solid black lines in the 3D model). 45
- 3.8 Model of horizontal plate : (a) results of inversion using only surface data with depth weighting and experimental C_p ; (b) results of inversion using surface+borehole data with a norm matrix (equation 3.14) and experimental C_p . Both figures represent vertical cross sections along $y=750$ m. Black dotted lines are the projections of the boreholes 46

3.9	(a) Gravity data from the region of Rouyn-Noranda and (b) density samples location. The town of Rouyn-Noranda is located in the lower right corner of the study area. Boreholes are located in the central part of the study area.	48
3.10	The Bouguer anomaly of the domain of inversion.	49
3.11	The residual gravity anomaly showing the location of profiles AA', BB', CC' and the domain of inversion (solid black line) using borehole densities (figure 3.15).	50
3.12	Variograms (dashed lines) and covariograms (dashed dotted lines) of surface densities. An exponential model of variogram is used.	51
3.13	Density sections of the BRG at UTME=634000 (north-south). The position is indicated on the residual gravity in map figure 3.11. FP=Flavrian Pluton. MvR=Metavolcanic Rocks. TSR=Timiskaming Sedimentary Rocks. RF=Rouyn Fault. HuCF=Hunter Creek Fault. . .	53
3.14	Density sections of the BRG at (a) UTMN=5353000 (east-west) and (b) UTMN=5357000 (east-west). Their positions are indicated on the residual gravity in map figure 3.11. FP=Flavrian Pluton. DP=Dufault Pluton. MvR=Metavolcanic Rocks. MR= Mafic Rocks. D= Diorite. HuCF= Hunter Creek Fault.	54
3.15	(a) Surface and (b) boreholes density data. The location of profiles AA' and boreholes is shown.	57
3.16	Variograms and covariograms of AN-51 and AN-67 borehole densities. Gaussian models are used for the variograms.	58

3.17	Comparison of models obtained from inversion (a) without density constraints, and (b) using surface+borehole densities. Both sections (UTMN=5357750) are shown in the surface density map (figure 3.15a). FP=Flavrian Pluton. D=Diorite. HuCF=Hunter Creek Fault. The AN-67 borehole is drawn in thick black line	59
3.18	Ellipsoid with ranges equal to a_x , a_y and a_z respectively along the three main axes.	62
4.1	Modèle de plaque horizontale de dimension $300 \times 300 \times 100$ mètres et les variogrammes calculés dans les trois directions principales x,y et z	68
4.2	Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages situés à 700 mètres du centre de la plaque.	69
4.3	Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages situés à 283 mètres du centre de la plaque.	70
4.4	Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages interceptant la plaque	71
4.5	Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec un forage passant au centre de la plaque	72
4.6	Résultats de l'inversion du dyke incliné avec ajout de bruit gaussien sur les données	74
4.7	Dyke synthétique incliné : variogrammes expérimentaux ajustés par un modèle gaussien et covariogrammes correspondants	76
4.8	Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance gaussien. Le modèle est représenté en tiret blanc.	77
4.9	Dyke synthétique incliné : variogrammes expérimentaux ajustés par un modèle sphérique et covariogrammes correspondants	78

4.10	Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance sphérique. Le modèle est représenté en tiret blanc.	79
4.11	Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance erroné dont la portée maximale est perpendiculaire à l'allongement du dyke	80
4.12	Variogramme (-) et covariogramme (-.) des densités obtenues à partir d'un modèle initial de covariance erroné (figure 4.11)	81
4.13	Modèle de dyke synthétique (en gris clair) avec modèle initial (en gris foncé)	83
4.14	Résultat de l'inversion du dyke incliné avec le modèle initial illustré en figure 4.13. La figure représente une coupe verticale en $y=550$ mètres. Le modèle synthétique est représenté en trait noir continu et le modèle initial est représenté en trait blanc continu	83
A.2	Discrétisation 3D avec prisme élémentaire	94

Liste des annexes

ANNEXE A : EXPRESSION DE LA MINIMISATION DE LA FONCTION OBJECTIVE	91
ANNEXE B : EXPRESSION DU CHAMP DE GRAVITÉ POUR UN PRISME RECTANGULAIRE	93

Liste des sigles et abréviations

- A** : matrice des dérivées partielles des réponses calculées ($\mathbf{f}(\mathbf{m})$) par rapport aux paramètres (\mathbf{m}).
- a** : portée des variogrammes [m]
- BRG** : Blake River Group
- C** : palier des variogrammes $[kg/m^3]^2$
- C_d** : matrice de covariance des erreurs sur les données $[mGal]^2$
- C(h)** : covariogramme $[kg/m^3]^2$
- C_p** : matrice de covariance des paramètres $[kg/m^3]^2$
- C₀** : effet de pépite des variogrammes $[kg/m^3]^2$
- d** : vecteur des observations [mGal]
- e** : vecteur des écarts entre les observations et les réponses calculées [mGal]
- f(m)** : vecteur des réponses calculées [mGal]
- G** : constante universelle de la gravité égale à $6.67 \cdot 10^{-11} [Nm^2kg^{-2}]$
- g_z** : composante verticale de l'attraction gravitationnelle $[m/s^2]$
- I** : matrice identité
- L** : matrice des valeurs propres
- m** : vecteur des paramètres $[kg/m^3]$
- m₀** : vecteur des paramètres initiaux $[kg/m^3]$

- W : fonction de pondération [m^{-1}]
 α : azimut de la direction de la portée $a_{(\alpha,\theta)}$ [degré]
 β : facteur de pondération des paramètres en fonction de la profondeur
 γ : semi-variogramme [kg/m^3]²
 Φ : fonction objective
 ρ : densité [kg/m^3]
 σ_d^2 : variance des erreurs sur les données [$mGal$]²
 θ : pendage de la direction de la portée $a_{(\alpha,\theta)}$ [degré]
 θ_x : angle de rotation de l'ellipsoïde selon l'axe x [degré]
 θ_y : angle de rotation de l'ellipsoïde selon l'axe y [degré]
 θ_z : angle de rotation de l'ellipsoïde selon l'axe z [degré]

Chapitre 1

introduction

1.1 Méthodes d'interprétation en gravimétrie

L'interprétation gravimétrique se divise en deux types de méthode : l'une est appelée méthode directe (modélisation) dans laquelle on détermine la réponse, en l'occurrence le champ gravitationnel, d'un modèle typique tel qu'une sphère, un cylindre, une plaque, une faille. Si l'on connaît les réponses de ces corps et si on les compare aux mesures réelles, on peut approximer une structure sous-jacente. Ces manipulations nécessitent de connaître les relations entre les corps et les réponses gravimétriques qu'ils induisent, soit au moyen de tables ou graticules, soit mathématiquement. Cette méthode peut s'avérer longue et inadéquate pour des structures complexes. L'autre méthode dite indirecte (inversion) consiste à trouver par optimisation un modèle de paramètres physiques dont la réponse calculée va correspondre aux observations. L'optimisation se fait généralement en minimisant l'écart entre les données calculées et les données réelles. De nombreuses branches des sciences physiques aussi diverses que la tomographie médicale, la localisation de séismes, la navigation par satellite, utilisent des algorithmes d'inversion.

1.2 Développements mathématiques

Il est crucial de choisir une procédure de modélisation qui décrit adéquatement les observations. Soit \mathbf{m} un modèle de paramètres physiques, les données calculées sont données par la relation $\mathbf{f}(\mathbf{m})$ où \mathbf{f} est l'opérateur mathématique. C'est ainsi que la modélisation directe utilise une formulation mathématique pour établir une réponse calculée causée par un modèle donné de paramètres. En gravimétrie, les données sont représentées par les mesures du champs gravimétrique et pour tout ce qui suit, nous considérerons les paramètres comme des densités. Le modèle de paramètres est ainsi un modèle de densité du sous-sol. L'opérateur $\mathbf{f}(\rho)$ se définit comme l'accélération équivalente à :

$$\bar{\mathbf{f}} = -G\rho\frac{dV}{r^2}\bar{\mathbf{r}} \quad (1.1)$$

où G représente la constante universelle égale à $6.67 \cdot 10^{-11} \text{ Nm}^2/\text{Kg}^2$ dans le système international (SI). ρ est la densité du corps homogène de volume dV à la distance r d'où est mesurée l'attraction (figure (1.1)).

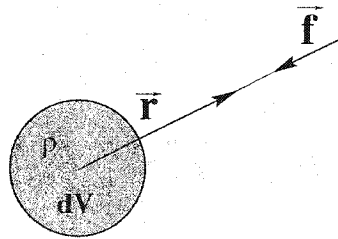


Figure 1.1: Loi de l'attraction universelle (Newton)

En inversion gravimétrique tridimensionnelle, il est pratique de subdiviser préalablement la subsurface en blocs auxquels seront assignée une valeur de densité (paramètres à rechercher). Pour l'instant, on peut seulement mesurer la composante verticale de l'attraction gravitationnelle due aux blocs. Nagy (1966) a publié des

solutions pour l'attraction d'un prisme élémentaire de densité ρ à la distance R (figure 1.2). Pour un prisme dont les dimensions sont $\Delta x = x_2 - x_1$, $\Delta y = y_2 - y_1$ et $\Delta z = z_2 - z_1$, cette solution au point $P(x, y, z)$ s'écrit :

$$g_z(\rho_i) = G\rho_i \left[\left[\left[x \ln(y + R) + y \ln(x + R) + z \arctan\left(\frac{xy}{zR}\right) \right]_{x_1}^{x_2} \right]_{y_1}^{y_2} \right]_{z_1}^{z_2} \quad (1.2)$$

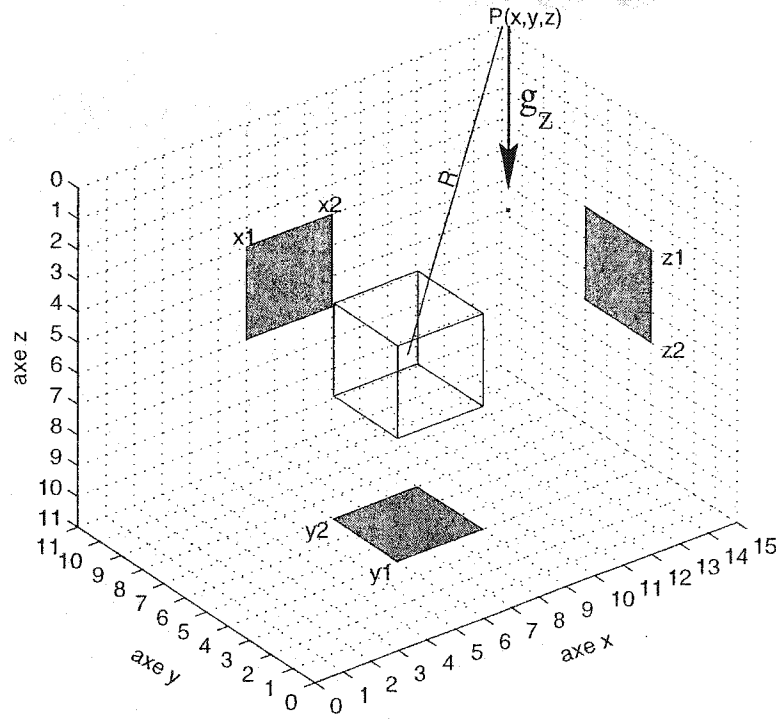


Figure 1.2: Composante verticale du champ gravitationnel due à l'attraction d'un prisme élémentaire dense

Comme l'une des propriétés du champ de pesanteur est d'être additif, l'attraction totale en un point quelconque peut s'écrire comme l'addition des attractions dues à chaque prisme. Ainsi, pour N prismes, on calcule au point P , le champ g_z suivante :

$$g_z = \sum_{i=1}^N g_z(\rho_i) \quad (1.3)$$

En géophysique, le problème inverse se réduit à déterminer un modèle qui minimise l'écart entre les données calculées $\mathbf{f}(\mathbf{m})$, $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_p)$ étant le vecteur des p paramètres à estimer) et les n observations que l'on appellera $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_n)$. En d'autres termes, on souhaite calculer des réponses se rapprochant le plus possible des observations. Cet écart peut s'illustrer par le vecteur erreur $\mathbf{e} = \mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})$. Habituellement, on cherche à minimiser la norme des erreurs au carré, c'est à dire, la fonction Φ qu'on appelle fonction objectif :

$$\Phi = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}))^T (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})) \quad (1.4)$$

La racine carrée de ce terme divisé par le nombre d'observations est connue sous le nom d'erreur quadratique moyenne ou erreur rms ("root mean square error"). L'équation 1.2 donne une relation linéaire entre la réponse calculée et les paramètres. On a : $\mathbf{f}(\mathbf{m}) = \mathbf{A}\mathbf{m}$ où \mathbf{A} est la matrice de sensibilité (ou jacobienne). Les éléments $\{a_{i,j}\}$ de la matrice \mathbf{A} représentent la contribution du $j^{\text{ème}}$ paramètre à la réponse calculée à la position de la $i^{\text{ème}}$ observation. Soit \mathbf{m}_0 le vecteur initial estimé des paramètres et $\mathbf{f}(\mathbf{m}_0)$ la réponse calculée initiale correspondante. Une perturbation du modèle de $\mathbf{m} - \mathbf{m}_0$ peut être représentée par le développement suivant :

$$\mathbf{f}(\mathbf{m}) = \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) + \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (1.5)$$

Le choix des perturbations des paramètres se fera de façon à minimiser le carré des erreurs entre la réponse calculée et les données. En combinant l'équation 1.4 et 1.5, on obtient :

$$\Phi = \mathbf{e}^T \mathbf{e} = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0))^T (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)) \quad (1.6)$$

La minimisation de la fonction Φ implique que $\partial\Phi/\partial m = 0$, ce qui donne la solution de :

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 + (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0)) \quad (1.7)$$

L'inverse de $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ n'existe généralement pas car on a beaucoup plus de paramètres à estimer que de données disponibles.

Une revue de littérature plus détaillée sur les méthodes d'inversion est présentée dans la partie "introduction " du chapitre 3 correspondant à la publication d'un article.

1.3 Inversion gravimétrique 3D utilisant la covariance des paramètres

Lorsque l'on divise la zone d'étude en blocs de façon aussi fine que l'on désire représenter la complexité du sous-sol, il apparaît souvent que le nombre de paramètres à estimer sera plus important que le nombre d'observations dont on dispose. Ainsi, il apparaît une ambiguïté du fait que le modèle de paramètres estimé n'est pas unique, car le système linéaire de l'équation (1.7) comporte plus d'inconnues (\mathbf{m}) que d'équations ($\mathbf{f}(\mathbf{m})$). Dans ce cas, le problème est dit sous-déterminé (sur-déterminé dans le cas contraire) et une infinité de solutions existent. De plus, la non unicité de la solution est inhérente à la théorie du champs de gravité qui répond à la loi de Gauss : La composante verticale de l'attraction gravitationnelle est proportionnelle à l'excès de masse sous la surface de mesure, sans aucune supposition concernant le contraste de densité ou la forme de la source. Ainsi, une série d'observations peut être expliquée par des distributions de densité différentes. Pour contrecarrer cette ambiguïté, on doit ajouter au processus d'inversion des informations qui ne sont pas contenues dans l'équation (1.4). Beaucoup d'études ont été faites sur l'introduction de ces informations en inversion 3D.

Les données gravimétriques sont bien souvent entachées d'erreurs. Ces erreurs surviennent, en premier lieu, au moment de la prise des mesures (imprécision de lecture sur le gravimètre). En outre, les corrections topographiques, de plateau et d'air libre, les localisations des stations (coordonnées et altitudes) induisent également des erreurs. Ces erreurs ne sont pas indépendantes entre elles puisqu'elles sont liées à la qualité du modèle topographique utilisé pour effectuer les corrections. Si le modèle topographique est erroné, les erreurs seront spatialement corrélées. De même, les erreurs qui proviennent de la modélisation d'une anomalie (krigeage, interpolation

linéaire) sont dépendantes les unes des autres, et leur corrélation dépendra de leur proximité. Connaissant ces erreurs, on peut définir une matrice \mathbf{C}_d de covariance des erreurs sur n données qui s'écrit :

$$\mathbf{C}_d = \begin{pmatrix} \sigma_{d_1}^2 & \sigma_{d_1,d_2} & \cdots & \sigma_{d_1,d_n} \\ \sigma_{d_2,d_1} & \sigma_{d_2}^2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d_n,d_1} & \sigma_{d_n,d_2} & \cdots & \sigma_{d_n}^2 \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

avec σ_{d_i,d_j} la covariance des erreurs entre les données i et j . On peut alors décider de minimiser la fonction objectif :

$$\Phi_d = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})) \quad (1.9)$$

La solution de l'équation (1.9) est une relation pour les paramètres à estimer analogue à la solution de l'équation (1.4). Dans ce cas, chaque ajustement entre une donnée et une réponse devient alors inversement pondéré par les éléments correspondant à la matrice de covariance. Si la matrice est diagonale (lorsque l'on ne tient pas compte des erreurs corrélées), cela signifie que les observations avec une grosse incertitude auront une contribution faible relativement à celles qui ont une meilleure précision (Meju, 1994).

Dans certains cas, une bonne connaissance de la géologie du site étudié peut nous amener à une bonne idée de la solution et nous permettre d'identifier un modèle \mathbf{m}_0 qu'on appellera modèle de référence ou initial. On peut alors imposer, dans notre minimisation, que le modèle recherché \mathbf{m} ne s'éloigne pas trop de ce modèle de référence (Sen et Stoffa, 1995). On cherchera alors à minimiser la fonction :

$$\Phi_m = (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (1.10)$$

Ceci étant, on peut détenir une meilleure information sur certains paramètres du modèle que sur d'autres. On voudrait ainsi que ces paramètres ne varient pas significativement du modèle de référence relativement aux autres dont on voudrait donner plus de latitude (Menke, 1984). Il existe également une corrélation entre paramètres qui doit, elle aussi dépendre de la proximité des paramètres. Un moyen d'introduire cette information est d'utiliser une matrice de covariance des paramètres \mathbf{C}_p qui s'écrit, pour un nombre p de paramètres :

$$\mathbf{C}_p = \begin{pmatrix} \sigma_{p_1}^2 & \cdots & \cdots & \cdots & \sigma_{p_1, p_p} \\ \vdots & \ddots & & \sigma_{p_j, p_k} & \vdots \\ \vdots & & \sigma_{p_i}^2 & & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ \sigma_{p_p, p_1} & \cdots & \cdots & \cdots & \sigma_{p_p}^2 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

où les éléments $\sigma_{p_i}^2$ formant la diagonale représentent les variances des paramètres, les autres éléments σ_{p_j, p_k} non diagonaux étant les covariances entre les $j^{\text{ème}}$ et $k^{\text{ème}}$ paramètres. Ainsi, en minimisant la fonction :

$$\Phi_m = (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (1.12)$$

on contraint chaque variation de paramètre selon la corrélation qu'il a avec les autres paramètres. Ainsi, une forte corrélation entre deux paramètres impliquera des variations conjointes des deux paramètres.

Le principe de l'inversion présenté par Tarantola (1982) porte sur la minimisation conjointe des deux fonctions objectifs en (1.9) et (1.12), c'est à dire de la minimisation de la fonction objectif :

$$\Phi = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})) + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (1.13)$$

Cette minimisation tient compte à la fois de l'ajustement des données synthétiques sur les observations et de l'ajustement d'un modèle recherché sur un modèle de référence. Ces deux ajustements sont respectivement pondérés par la matrice de covariance des erreurs sur les données et celle des paramètres, et leur contribution à la solution dépendra des valeurs de covariance. Si, par exemple, nous avons une bonne connaissance des paramètres, alors les valeurs de la matrice \mathbf{C}_p seront faibles et le terme $(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{C}_p^{-1} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)$ sera prépondérant dans la minimisation. La solution sera alors plus influencée par le modèle de référence que par les observations.

Les données de gravité en surface n'offrent pas une bonne résolution de la distribution de la densité en profondeur. Ceci est dû aux termes de la matrice de sensibilité, appelés fonctions de noyau qui décroissent rapidement avec la distance. En conséquence, l'inversion aura tendance à générer une distribution de densité concentrée près de la surface, car les cellules en profondeur auront peu d'influence dans le calcul des réponses. Li et Oldenburg (1998) ont proposé d'introduire dans la fonction objectif, une fonction $W(z)$ qui pondère les densités en fonction de leur profondeur :

$$\Phi_m = ||W(z)(\rho - \rho_0)||^2 \quad (1.14)$$

avec

$$W(z) = \frac{1}{(z + z_0)^{\beta/2}} \quad (1.15)$$

où z_0 dépend du niveau de référence auquel ont été prises les mesures. Étant donné que l'effet gravitationnel décroît avec l'inverse de la distance au carré, les auteurs ont estimé qu'une valeur de β comprise dans l'intervalle $[1.5 : 2]$ produisait des résultats satisfaisants. Nous nous proposons d'introduire cette forme de pondération dans la fonction objectif en (1.13) qui s'écrit alors :

$$\Phi = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})) + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{W}_z^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W}_z (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (1.16)$$

pour laquelle la solution s'écrit, en considérant que \mathbf{W}_z est une matrice diagonale :

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 + \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{A}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0)) \quad (1.17)$$

Comme l'on a habituellement moins de données que de blocs dans le modèle, le produit matriciel $\mathbf{A} \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{A}^T$ est de plein rang et inversible. Si cette matrice n'était pas inversible, l'ajout de \mathbf{C}_d fait que la matrice devient alors inversible.

Si l'on pose $\mathbf{m}_0 = 0$, l'équation 1.17 devient :

$$\mathbf{m} = \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}_z^{-1} \mathbf{A}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} \mathbf{d} \quad (1.18)$$

ce qui, aux matrices de pondération \mathbf{W}_z près, représente le cokrigage de la densité par la gravité (Asli et al., 2000).

Le problème qui se pose alors est d'estimer la matrice de covariance \mathbf{C}_p , à priori inconnue. Nous allons voir, dans le chapitre suivant, comment on peut estimer ces covariances à partir du calcul de variogrammes expérimentaux des paramètres.

Chapitre 2

Le variogramme comme outil de calcul de la matrice de covariance des paramètres

2.1 Théorie des variogrammes

Beaucoup de variables dans la nature ne sont pas tout à fait distribuées aléatoirement, mais suivent un certain degré de ressemblance lorsqu'elles sont proches. Le variogramme permet de quantifier cette variabilité spatiale. Soit M la variable considérée distribuée dans un domaine 1D, 2D ou 3D, la valeur du variogramme (ou plus exactement du semi-variogramme) entre deux localisations distantes de h se calcule par la relation suivante (Deutch et Journel, 1992) :

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [M(x_i) - M(x_i + h)]^2 \quad (2.1)$$

où $N(h)$ est le nombre de paires d'observations distantes de h . Cet outil statistique est à la base de toute étude géostatistique relative aux gisements miniers.

L'hypothèse de "stationnarité du second ordre" (Matheron, 1965) du variogramme lui confère la propriété d'invariance par translation. C'est-à-dire que celui-ci ne dépendra plus des localisations des points d'observations mais seulement de la distance qui les sépare. Une fois calculé, le variogramme révèle trois informations, à savoir :

1. La portée a :

C'est la distance à laquelle deux observations ne se corréleront plus. La valeur du variogramme pour cette distance correspond à la variance de la variable.

2. Le palier C :

C'est la valeur du variogramme une fois la portée atteinte. Cette valeur correspond à la variance σ^2 de la variable.

3. L'effet de pépite C_0 :

C'est la variation de la variable à très petite échelle, la valeur du variogramme près de $h = 0$. C'est une mesure de la discontinuité de la variable. Un effet de pépite peut traduire une irrégularité de la variable due à l'existence d'une micro-structure de faible portée comparée au pas d'échantillonnage. Attention, ce n'est pas la valeur du variogramme en $h = 0$, on a $\gamma(0) = 0$.

La figure (2.1) montre ce que peut être l'allure d'un variogramme de type gaussien. Lorsque le palier du variogramme existe, on a une relation simple entre les valeurs du variogramme et la covariance entre deux observations distantes de h . On a :

$$\gamma(h) = \sigma^2 - C(h) \quad (2.2)$$

où $C(h)$ est le covariogramme (ou fonction d'auto-corrélation spatiale).

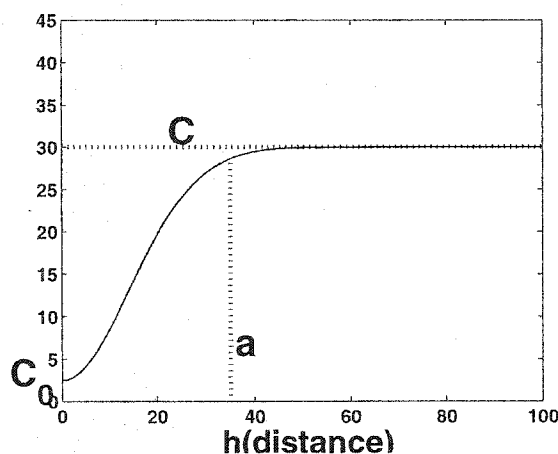


Figure 2.1: Exemple de modèle de variogramme de type gaussien

2.2 Modélisation

Les variogrammes expérimentaux sont calculés à partir de classes de distance h prédéterminées. Ceux-ci doivent être modélisés de façon à obtenir des valeurs fictives de variogramme pour n'importe quelle distance h . Les variogrammes expérimentaux 3D sont calculés à partir du programme *gamv3m* de la bibliothèque GSLIB et peuvent être établis dans plusieurs directions. Pour cette approche expérimentale, on construit un domaine tri-dimensionnel divisé en cellules de taille régulière, par exemple de $1 \times 1 \times 1$ mètre. On assigne à toutes les cellules une valeur de densité localisée au centre de celles-ci. Le calcul de variogrammes expérimentaux nécessite de faire des choix sur les paramètres à adopter tels que les pas d'échantillonnage (les classes de distance h), les tolérances angulaires sur l'azimut et sur le pendage, ceci afin d'obtenir un nombre suffisamment représentatif de paires $N(h)$ pour chaque classe de distance. Généralement, on considère qu'il faut au moins une trentaine de paires pour chacune des classes pour que la valeur associée du variogramme soit fiable. Dans notre cas, les localisations des variables sont alignées selon les axes principaux x , y et z . Lorsqu'on calcule des variogrammes directionnels selon ces axes, il n'est donc pas nécessaire d'avoir une large tolérance angulaire. A

la limite, une tolérance nulle pourrait suffire. De plus, les cellules étant de taille régulière, on peut se contenter d'une distance de tolérance constante pour toutes les classes de distance. L'ajustement d'un modèle de variogramme s'effectue soit visuellement par tâtonnements, soit automatiquement. Pour l'ensemble des variogrammes présentés par la suite, la méthode visuelle a été préférée. Cette méthode permettant d'éliminer de façon subjective des artéfacts présents dans les points expérimentaux. En géostatistique minière, les modèles parmi les plus courants sont les modèles sphériques (2.3), exponentiels (2.4) et gaussiens (2.5).

$$\text{sphérique : } \gamma(h) = C_0 + (C - C_0)[(1.5h/a) - 0.5(h/a)^3] \quad \text{si } 0 < h < a \quad (2.3)$$

$$\gamma(h) = C \quad \text{si } h \geq a$$

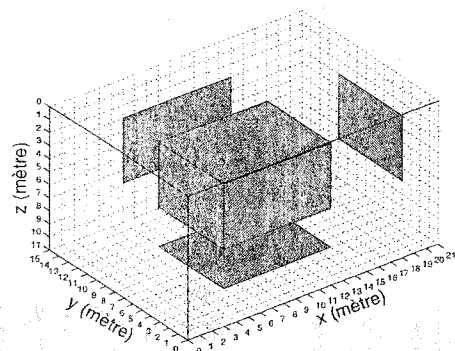
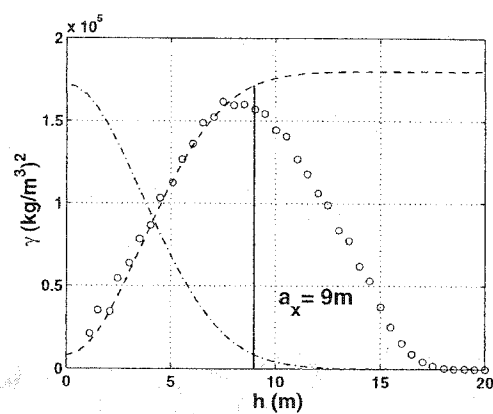
$$\text{exponentiel : } \gamma(h) = C_0 + (C - C_0)[1 - e^{(-h/a)}] \quad \forall h \quad (2.4)$$

$$\text{gaussien : } \gamma(h) = C_0 + (C - C_0)[1 - e^{-(h/a)^2}] \quad \forall h \quad (2.5)$$

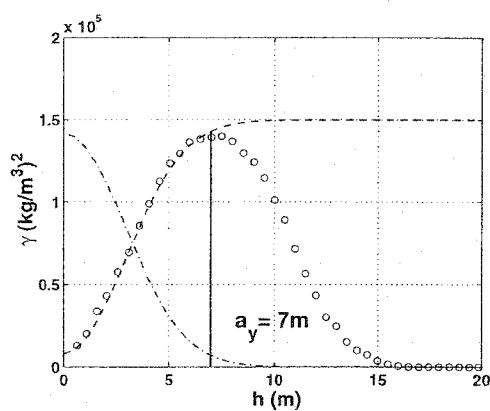
2.3 Résultats

On dispose d'un espace tridimensionnel (figure 2.2) dont la taille est de $21 \times 15 \times 11$ mètres. Le corps dense centré dans ce domaine a une dimension de $9 \times 7 \times 5$ mètres. La discrétisation du domaine pour les calculs de variogrammes est de $0.5 \times 0.5 \times 0.5$ mètres. Cette taille de discrétisation sera choisie pour tout les autres calculs des variogrammes de modèles synthétiques. On a assigné de façon arbitraire un contraste de densité de 1000 kg/m^3 aux cellules du corps et un contraste de densité nul aux cellules de l'encaissant. Ces valeurs sont affectées dans l'espace au centre de chaque cellule du maillage. Les trois variogrammes directionnels selon les trois axes prin-

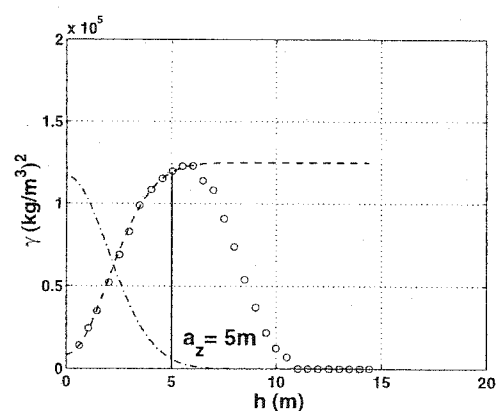
cipaux sont représentés en figure 2.2 ainsi que les covariogrammes correspondants. La taille des classes a été choisie à 0.5 mètre. Les tolérances angulaires selon le plan $x - y$ et selon l'axe z sont respectivement de 0 degré et de 1 degré. Les premiers points des variogrammes expérimentaux présentent une allure gaussienne. Les valeurs des portées a_x , a_y et a_z dans les 3 directions correspondent aux dimensions du corps dense dans les directions respectives. Notons que dans les cas de variogramme gaussien, la portée est atteinte à la distance pour laquelle la valeur du variogramme représente 95% de la variance. Notons qu'un modèle avec comportement linéaire à l'origine pourrait également s'ajuster.

(a) Modèle 3D de $9 \times 7 \times 5$ mètres

(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe x



(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe y



(d) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe z

Figure 2.2: Modèle de corps anisotrope ($9 \times 7 \times 5$ mètres) et les variogrammes calculés dans les trois directions spatiales

Des calculs de variogrammes expérimentaux sur des modèles de tailles différentes ont montré des résultats similaires sauf dans certains cas particuliers, à savoir :

1. Forte anisotropie :

Lorsque l'anisotropie est trop marquée, les variogrammes directionnels donnent une anisotropie apparente plus faible que l'anisotropie réelle. Ce cas est illustré en figure (2.3). Le modèle considéré est un corps dense (1000 kg/m^3) de taille $11 \times 3 \times 3$ mètres dans un encaissant (0 kg/m^3) de dimension égale à $25 \times 9 \times 9$ mètres. Les variogrammes directionnels en figure (2.3) donnent des portées de 7, 4 et 4 mètres respectivement dans les 3 directions x, y et z avec une tolérance angulaire azimutale de 2 degrés. Afin de se rapprocher le plus possible de l'anisotropie réelle, il faut minimiser la tolérance angulaire le plus possible. Pour cet exemple, l'anisotropie réelle dans le plan $x - z$ est de 3.7/1. L'anisotropie apparente est de 2.25/1. Elle est de 2/1 pour une tolérance angulaire de 4 degrés et de 1.75/1 avec 8 degrés.

2. Encaissant restreint :

Lorsque la taille du modèle est trop importante par rapport aux dimensions de l'encaissant, les variogrammes sont difficilement modélisables et s'ils le sont, les portées ne sont pas représentatives des dimensions du modèle. En fait, on considère généralement que dans le modèle, la taille de l'hétérogénéité ne doit pas dépasser la moitié de la taille de l'encaissant. Si tel n'est pas le cas, il pourrait alors être intéressant d'utiliser le covariogramme transitif qui ne dépend pas du domaine utilisé mais uniquement de l'objet s'y retrouvant. Le covariogramme transitif est défini comme :

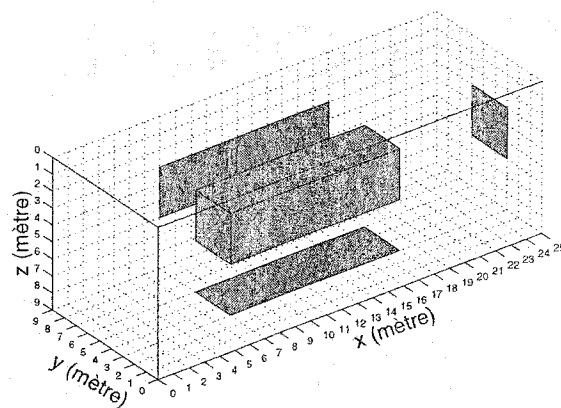
$$g(h) = \int_D Z(x)Z(x+h) \quad (2.6)$$

On voit que si l'on a un objet fini dans une mer de zéro, $g(h)$ ne change pas

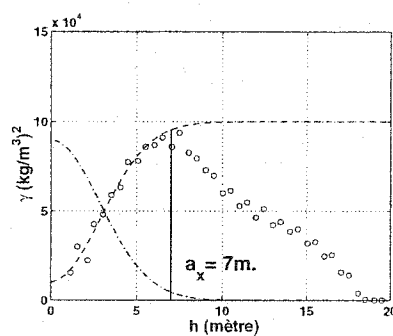
même si l'on modifie les limites de D .

3. Choix ambigu du modèle :

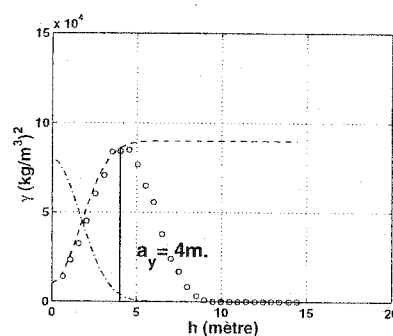
Le choix du modèle peut s'avérer délicat. On peut hésiter entre deux modèles de variogramme qui donneront des valeurs de paramètres significativement différentes. On verra dans le dernier chapitre comment ce choix peut affecter les résultats d'inversion.



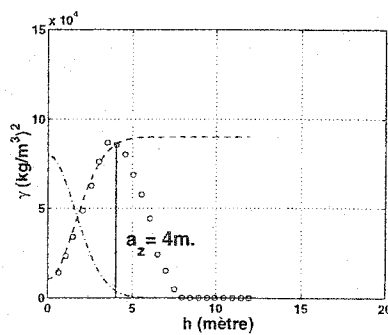
(a) Modèle anisotrope de $11 \times 3 \times 3$ mètres



(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe x



(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe y



(d) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe z

Figure 2.3: Modèle de corps anisotrope ($11 \times 3 \times 3$ mètres) et les variogrammes associés

2.4 Méthode de calcul du modèle de covariance

En considérant les portées a_x , a_y et a_z selon les trois axes principaux, on peut calculer la portée dans n'importe quelle direction de l'espace par la relation suivante (Marcotte D., 1998) :

$$a_{(\alpha,\theta)} = \frac{a_x a_y a_z}{[(a_y a_z \cos \alpha \cos \theta)^2 + (a_x a_z \cos \alpha \sin \theta)^2 + (a_x a_y \sin \alpha)^2]^{1/2}} \quad (2.7)$$

avec

$$\cos \theta = \frac{(x_j - x_i)}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}} \quad (2.8)$$

$$\sin \theta = \frac{(y_j - y_i)}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}} \quad (2.9)$$

$$\cos \alpha = \frac{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2}}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + (z_j - z_i)^2}} \quad (2.10)$$

$$\sin \alpha = \frac{(z_j - z_i)}{\sqrt{(x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2 + (z_j - z_i)^2}} \quad (2.11)$$

θ représente un angle de rotation à partir de l'axe x dans le plan $x-y$ et α un angle vertical à partir de l'axe z , semblable à un pendage. (x_i, y_i, z_i) et (x_j, y_j, z_j) sont les coordonnées des deux cellules entre lesquelles est calculée la portée $a_{(\alpha,\theta)}$. Il est possible de calculer, à partir de cette portée, une valeur $\gamma(h, \alpha, \theta)$ du variogramme modélisé. La valeur du palier correspondant est une valeur moyenne égale à $\overline{\sigma^2} = (\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2)/3$.

On a, dans le cas d'un modèle gaussien de variogramme :

$$\gamma(h, \alpha, \theta) = \overline{C}_0 + (\overline{\sigma^2} - \overline{C}_0)[1 - e^{-(h/a_{(\alpha,\theta)})^2}] \quad (2.12)$$

On a le covariogramme associé :

$$\mathcal{C}(h, \alpha, \theta) = \bar{\sigma}^2 - \gamma(h, \alpha, \theta) \quad (2.13)$$

Connaissant la distance et l'angle entre deux cellules, on peut alors calculer la covariance entre ces deux cellules et construire la matrice de covariance des paramètres. La figure (2.4) représente les valeurs de la matrice de covariance des paramètres pour un domaine 3D de $9 \times 5 \times 3$ mètres avec des portées égales à 6,4 et 3 mètres selon les axes principaux x,y et z. La variance est égale à 1 $(kg/m^3)^2$ et il n'y a pas d'effet de pépite. Le modèle employé est un modèle gaussien. La matrice est bien évidemment symétrique. De plus, on peut remarquer que la matrice comporte des symétries de blocs et il n'est donc pas nécessaire de calculer toute la partie supérieure de cette matrice. Ceci réduit significativement le temps de calcul. Dans le cas où l'ellipsoïde d'anisotropie n'est pas parallèle aux axes principaux, un système de rotations autour des trois axes principaux permet d'aligner les axes x,y et z selon les trois axes principaux de l'ellipsoïde. En considérant ces nouveaux axes de référence, on calcule les distances correspondantes aux paires de cellules (qui forment un vecteur) dans ce nouveau repère en appliquant ces mêmes rotations (Marcotte D., 1998). On peut alors calculer les nouveaux angles α et θ . Les matrices de rotation M_{θ_x} , M_{θ_y} et M_{θ_z} s'écrivent :

$$M_{\theta_x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta_x & -\sin \theta_x \\ 0 & \sin \theta_x & \cos \theta_x \end{pmatrix} \quad M_{\theta_y} = \begin{pmatrix} \cos \theta_y & 0 & \sin \theta_y \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \theta_y & 0 & \cos \theta_y \end{pmatrix}$$

$$M_{\theta_z} = \begin{pmatrix} \cos \theta_z & -\sin \theta_z & 0 \\ \sin \theta_z & \cos \theta_z & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

où θ_x, θ_y et θ_z sont les trois angles de rotation autour des trois axes principaux.

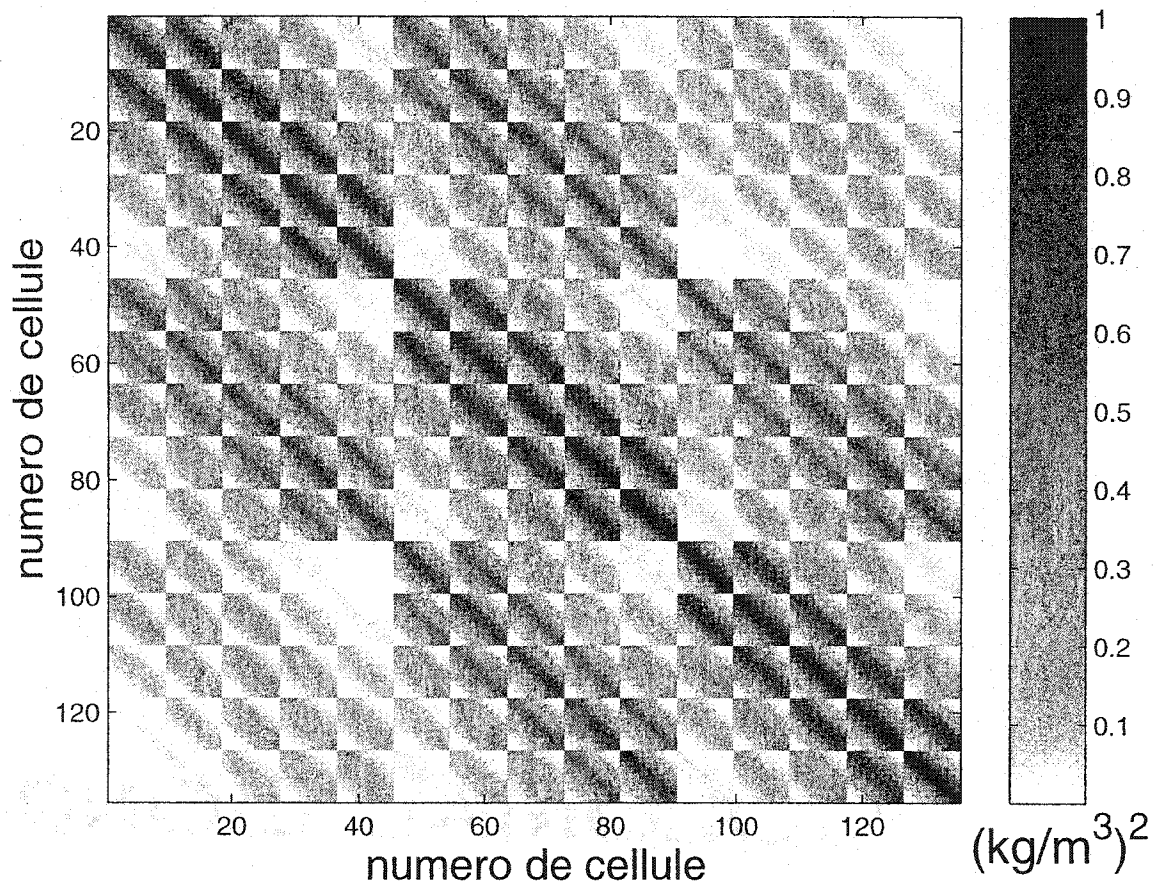


Figure 2.4: Exemple de matrice de covariance

Chapitre 3

3D gravity inversion using a model of parameter covariance

(publié en Janvier 2003 dans Journal of Applied Geophysics, volume 52, Issue 1, pages 59-74. Elsevier Edition - Amsterdam)

3.1 abstract

In a three-dimensional (3D) gravity inversion, there is a need to restrain the number of solution by adding constraints. We present an inversion method based on the stochastic approach. It attempts to minimize an objective function consisting of the sum of the data misfit squared norm weighted by the data error covariances and the model squared norm weighted by the parameter covariances. The minimization of the latter allows reconstruction of structures of different shapes. The algorithm also includes depth-weighting and may use borehole data. The effect of the selected parameter covariance matrix is illustrated in a comparison of two inversions for a dipping short dyke. These covariances can be determined either a priori using available geological data or experimentally by fitting density variograms. Depth-weighting

prevents the inversion from yielding undesirable shallow density structures when using ground survey data only ; however it cannot provide a good delineation of the bodies. Using borehole data in addition to surface data improves the determination of the geometry and position of the bodies. For the latter the depth weighting is replaced by weights that are dependent on the norm of the kernel terms. Density estimates, from outcrops samples or well logging data, can be set fixed where known within the model. Density positivity constraint can also be included when needed. Gravity data from the Blake River Group in the Rouyn-Noranda mining camp (Quebec, Canada) is used to show the performance of the method, with the inclusion of borehole and surface density data.

keyword : gravity, 3D, inversion, constraint, covariance, variogram, borehole

3.2 Introduction

The goal of gravity inversion is to estimate the parameters (densities, geometry) of a postulated underground model from a set of given gravity observations. In 3D gravity inversion, the model can be defined by surfaces (Barbosa et al., 1999), topographic variations (Oldenburg, 1974) or a grid of prismatic cells. In this paper, we use the later approach because of its great flexibility. The subsurface is discretized into prisms of known sizes and positions and the density contrasts are the parameters to estimate. Since the number of parameters can be much larger than the number of observations at ground level, the inversion gives rise to an under-determined system of equations (algebraic ambiguity). In addition, there are many equivalent density distributions below the surface that will reproduce the known field (theoretical ambiguity), because the gravity field follows Gauss's theorem (Blakely, 1995) : the vertical component of gravity is proportional to the total mass below, so long as the mass is bounded in a volume. There are no assumptions about the

shape of the source or how the density is distributed. Many strategies can be used to limit the number of acceptable models; they all involve some kind of constraints to restrict the resulting solution. A priori information can take several forms. It may be previously obtained from geophysical or geological data either on the surface or in boreholes, or it may simply be dictated by the physics of the problem.

When the geological information is particularly well defined, some prisms may have their densities assigned to specific values (Braille et al., 1974). Some authors minimize the volume of the causative body (Green, 1975; Last and Kubik, 1983) and Guillen and Menichetti (1984) invoke minimum source moment of inertia. One may expect that density vary slowly with position or, conversely, vary quickly or sharply. Smoothness or roughness of density distribution which control gradients of parameters in spatial directions can be introduced. This has been used in magnetic inversion by Pilkington (1997).

The response is sensitive to shallow structure because the kernel functions decay with the inverse squared depth. As a consequence, inversion will generate a density distribution mostly concentrated near the surface. This tendency can be overcome by introducing a depth weighting to counteract the natural geometric decay. Li and Oldenburg (1998) have shown that it was reasonable to approximate the decay with depth by a function of the form : $w(z) = 1/(z + z_0)^{\beta/2}$. where β is usually equal to 2 and z_0 depends upon a reference level. Another 3D inversion technique allowing definition of depth resolution is proposed by Fedi and Rappola (1999). They use a 3D set of data, providing field information along the vertical direction, for retrieving deep sources.

Prior information in the form of parameters covariances can be included (Tarrantola and Valette, 1982) to orient the search for a solution. This a priori information may come from different sources either experimentally, from rock density measu-

rements, or result from a posteriori information of a previous inverse problem run with a different data set (Lee and Biehler, 1998). Pilkington and Todoeschuk (1991) found that the well log power spectra was proportional to a power α of the frequency. This value α is useful to control the smoothness of the model parameter and the covariances can be calculated numerically. Montagner and Jobert (1988) used exponential covariance functions in which the rate of exponential decay determines the correlation length of the parameters. The parameter covariance can be also estimated from the data covariance (Meju, 1992; 1994, Asli and al., 2000).

In this paper, we propose to introduce a model of covariance parameters from the estimation of a 3D variogram model. This model is established by using experimental variograms calculated in the three spatial directions. From the model of variogram, a model of covariogram can be easily established

3.3 Methodology

Let the observations for a set of n data be represented by the vector $\mathbf{d} = (d_1, d_2, \dots, d_n)$, and let the model response fitting data be the vector $\mathbf{f}(\mathbf{m})$ which is a function of p parameters being represented by the vector $\mathbf{m} = (m_1, m_2, \dots, m_p)$. Since the calculated model response is a linear function of the model parameters, we have : $\mathbf{f}(\mathbf{m}) = \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) + \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)$ (Lines and Treitel, 1984). \mathbf{A} is the jacobian matrix depending of the geometry of the domain. Element a_{ij} of \mathbf{A} represents the contribution from the j^{th} parameter to the gravity response at the location of i^{th} observation. \mathbf{m}_0 represents the initial model of parameters which should preferably be a good guess of the achieved distribution.

Considering the vector \mathbf{e} as errors between the calculated model response and data, we can write : $\mathbf{e} = \mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})$. Classic inversion minimizes errors between data and the model response by least squares method, i.e. one minimizes the following

objective function : $\Phi_d = \mathbf{e}^T \mathbf{e}$.

In the approach presented here, we introduce some constraints in our minimization in the form of parameter covariance, data errors covariance and depth weighting. Our algorithm will follow the stochastic approach of Tarantola and Valette (1982) which minimizes the objective function (see also : Menke, 1984, Sen and Stoffa, 1995) :

$$\Phi = (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m})) + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{W}^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) \quad (3.1)$$

Equation 3.1 consists in the sum of a data objective and a model objective functions. The first term represents the data residuals weighted by the data error covariance matrix \mathbf{C}_d (weighted least squares minimization), while the second measures the deviation of the parameters from an initial model \mathbf{m}_0 , weighted by the parameter covariance matrix \mathbf{C}_p and a depth weighting matrix \mathbf{W} .

$$\mathbf{C}_p = \begin{pmatrix} \sigma_{m_1}^2 & \sigma_{m_1, m_2} & \cdots & \sigma_{m_1, m_p} \\ \sigma_{m_2, m_1} & \sigma_{m_2}^2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{m_p, m_1} & \cdots & \cdots & \sigma_{m_p}^2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{C}_d = \begin{pmatrix} \sigma_{d_1}^2 & \sigma_{d_1, d_2} & \cdots & \sigma_{d_1, d_n} \\ \sigma_{d_2, d_1} & \sigma_{d_2}^2 & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma_{d_n, d_1} & \cdots & \cdots & \sigma_{d_n}^2 \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} 1/z_{m_1}^\beta & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/z_{m_2}^\beta & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1/z_{m_p}^\beta \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

As mentioned in the introduction, depth weighting is required to reduce the

large sensitivity of the shallow cells (Li and Oldenburg, 1998). After testing different values of β , we find an acceptable value of β equal to 0.85, close to the value found by Boulanger and Chouteau (2001) which use $W_{m_i} = 1/(z_{m_i} + \epsilon)^\beta$ with $\beta = 0.9$ and a small value ϵ for prevent singularity when z is close to 0.

The minimization of equation 3.1 requires that $\partial\Phi/\partial m = 0$, whose solution is then :

$$\mathbf{m} = \mathbf{m}_0 + \mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}_p\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{W}^{-1}\mathbf{C}_p\mathbf{W}^{-1}\mathbf{A}^T + \mathbf{C}_d)^{-1}(\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0)) \quad (3.4)$$

As the problem is linear with regard to the model parameters, the solution is obtained directly from equation 4 whatever the initial model \mathbf{m}_0 . In the present paper, the inverse matrix calculation is done by singular value decomposition (SVD). This method has been preferred to the conjugate gradient algorithm (GCA) used by Li and Oldenburg (1998) and Boulanger and Chouteau (2001) because it is numerically stable and it is a standard tool for small inverse problem. Moreover, SVD consumes less time than that needed for GCA (Pilkington, 1997). For large problems, pre-conditioned CGA is needed. Since the problem is effectively underdetermined, the singularity condition could occur if $\mathbf{C}_d = \mathbf{0}$, some eigenvalues would be null or very small along the diagonal. Fortunately, the addition of the data error variance to the diagonal terms counteract the singularity. Supposing that data errors are uncorrelated, \mathbf{C}_d takes commonly the form of a diagonal matrix $\mathbf{C}_d = \sigma_d^2 \mathbf{I}$ where σ_d^2 is the estimated data error variance. A very interesting relationship exists between this type of inversion and the cokriging used in geostatistics. From eq. 4, if $\mathbf{W} = \mathbf{I}$,

$\mathbf{m}_0 = \mathbf{0}$ and $\mathbf{C}_d = \sigma_d^2 \mathbf{I}$, we can write (Marcotte, 2002) :

$$\begin{aligned} \mathbf{m} &= \mathbf{C}_p \mathbf{A}^t (\mathbf{A} \mathbf{C}_p \mathbf{A}^t + \mathbf{C}_d)^{-1} \mathbf{d} \\ &= \mathbf{C}_p \mathbf{A}^t \mathbf{K}_d^{-1} \mathbf{d} \end{aligned} \quad (3.5)$$

where $\mathbf{K}_d = \mathbf{A} \mathbf{C}_p \mathbf{A}^t + \sigma_d^2 \mathbf{I}$ which is the data covariance matrix. Equation 3.5 yields the parameter \mathbf{m} estimated by cokriging the gravity response \mathbf{d} .

This weighting procedure allows the more precise observations (low variance) to have a greater weight than the other observations in the overall error estimation. The second term in equation 3.1 describes the deviation of the current inverted model from the initial model. Parameter variations are guided by the imposed parameter covariances. If better prior information about true parameters is known, the elements of the matrix \mathbf{C}_p are small and more weight is placed on the model norm terms in (3.1) and the solution is less influenced by the observations. In many cases, the elements of the matrix \mathbf{C}_p are difficult to estimate accurately because parameters are unknown. The following synthetic cases will show that \mathbf{C}_p can be statistically estimated by the use of variograms.

3.4 Covariance model calculation

Ground density distribution is not random but follows a statistic measured by the variogram $\gamma(h)$ (or the autocorrelation function). If Z is the variable, the variogram can be computed according to Deutch and Journel, 1992; David, 1997, by the relation :

$$\gamma(h) = \frac{1}{2N(h)} \sum_{i=1}^{N(h)} [Z(x_i) - Z(x_i + h)]^2 \quad (3.6)$$

where $N(h)$ represents the number of pairs of observations which are separated by a distance h . The experimental variogram (calculated according to equation 3.6) can be modelled using analytical models such as spherical, gaussian, exponential, depending on their aspect. To do this we need three parameters : the range, the sill and the nugget effect (Matheron, 1969). The range is the distance after which no more correlation exists between two observations. The sill is the limit value of the variogram at the distant equal to the range. If it exists, the sill represent the variance of the variable. The nugget effect represents the very small scale variation. Covariance model $C(h)$ is linked with the model variogram by :

$$\gamma(h) = \sigma^2 - C(h) \quad (3.7)$$

where σ^2 is the variance.

Figure 3.1a shows a prismatic body ($9 \times 7 \times 5$ meters) displaying a density contrast of 1000 kg/m^3 with the homogeneous host rock ($21 \times 15 \times 11$ meters). The given density represents the regionalized variable and experimental variograms describing the spatial continuity of the variable can be calculated. Only the first experimental points are used to fit a variogram model. Directional experimental variograms in the x,y and z directions (figure 3.1b,c,d) fit a gaussian model variogram which is

written :

$$\gamma(h) = C_0 + (C - C_0)[1 - e^{-3(h/a)^2}] \quad (3.8)$$

where C_0 is the nugget effect, C is the sill and a is the range. In this notation, a is the effective range for which the variogram value is equal to 95 % of the sill. The ranges a_x , a_y and a_z found by curve fitting are equal to the dimensions of the body (9, 7 and 5 meters); the anisotropy of the variograms in the three directions reflects the shape of the body. The average sill is $\bar{\sigma}^2 = 1.52 \times 10^5; (kg/m^3)^2$, corresponding to the variance and the average nugget effect is $\bar{C}_0 = 8000 (kg/m^3)^2$. Linear models could fit also the experimental variograms.

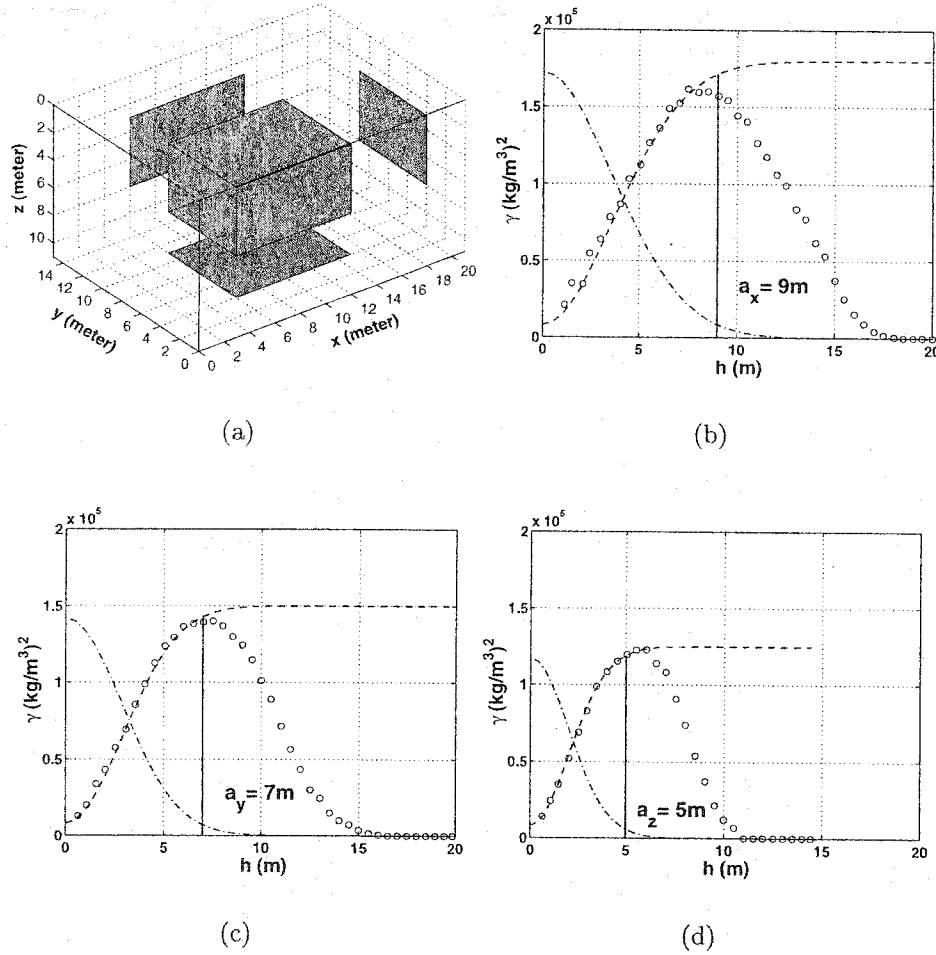


Figure 3.1: (a) Prismatic model having a density contrast $\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$. (b), (c) and (d) Directional variograms of density distribution in the x, y and z directions respectively. Gaussian models of variogram (dashed line) are drawn by fitting the experimental values (circles). Covariograms are drawn in dash-dotted line.

Considering x,y and z axes as ellipsoid axes, we can calculate the range $a_{(\alpha,\theta)}$ in any spatial directions from a_x, a_y, a_z using (see appendix) :

$$a_{(\alpha,\theta)} = \frac{a_x a_y a_z}{\left[(a_y a_z \cos \alpha \cos \theta)^2 + (a_x a_z \cos \alpha \sin \theta)^2 + (a_x a_y \sin \alpha)^2 \right]^{1/2}} \quad (3.9)$$

where θ represents the angular direction from x-axis in the x-y plane (azimuth) and α is a vertical angle from z-axis, similar to a dip. $\gamma(h, \alpha, \theta)$ can be evaluated from the range $a_{(\alpha,\theta)}$ and an average sill $\bar{\sigma}^2$ and an average nugget effect \bar{C}_0 . We have :

$$\gamma(h, \alpha, \theta) = \bar{C}_0 + (\bar{\sigma}^2 - \bar{C}_0)[1 - e^{-3(h/a_{(\alpha,\theta)})^2}] \quad (3.10)$$

From eq. (3.10) and (3.7), we can estimate the parameter covariance at all distances and in all directions of the parameter space. Each element c_{ij} (covariance between the i^{th} and j^{th} cells) of the matrix \mathbf{C}_p corresponding to a distance and a direction, can then be determined. In the case that the principal axes of the ellipsoid are not parallel to the reference axes, a transformation by rotation is applied in order to align the reference axes to the principal ellipsoid axes. Three rotations around each reference axis are needed. We calculate the new coordinates of a pair of cells in this new reference system. Then we can calculate the new angle α and θ and use the relation in equation 3.9. The use of existing symmetries drastically reduces the computation time. It is obvious that \mathbf{C}_p is symmetrical ($c_{ij} = c_{ji}$) in any case. Therefore, calculation of the lower triangular part of the matrix is sufficient. Moreover, two pairs of parameters will have the same covariance if the corresponding pairs of cells have the same direction and distance. Consequently, the number of operations can significantly be reduced in a 3-D regularly gridded volume.

3.5 Application to synthetic data

Vertical component of the gravitational attraction was computed for an ensemble of rectangular prisms representing the density distribution within the subsurface. Nagy (1966) published solutions for the vertical attraction computed at a distance R of an elementary prism of dimensions $(x_i, x'_i; y_i, y'_i; z_i, z'_i)$ with sides parallel to the coordinate axes and a density contrast of ρ_i . G is the universal gravitational constant :

$$g_z(\vec{r}, \vec{r}_i) = G\rho_i \left[\left[\left[x \ln(y + R) + y \ln(x + R) + z \arctan\left(\frac{xy}{zR}\right) \right]_{x_i}^{x'_i} \right]_{y_i}^{y'_i} \right]_{z_i}^{z'_i} \quad (3.11)$$

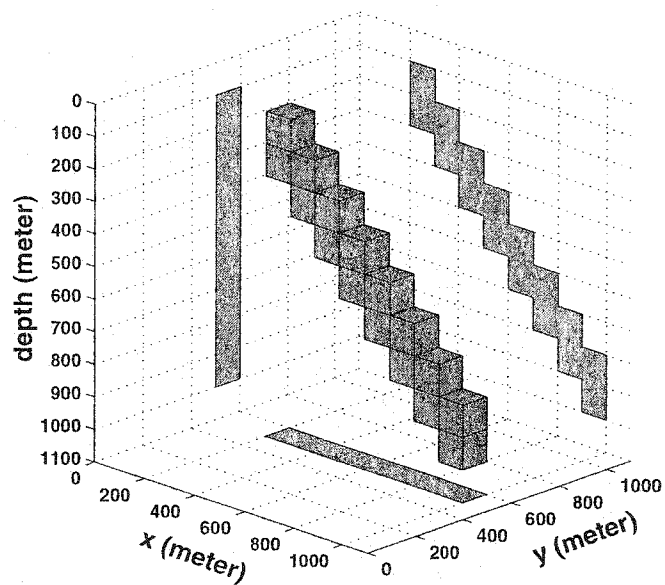
where \vec{r} is the position where g_z is computed referenced to the axes origin and \vec{r}_i is the position of the center of the i^{th} prism ($\vec{R} \neq \vec{r} - \vec{r}_i$). The expression between brackets is the gravity kernel. For an ensemble of n prisms, the total gravity attraction measured at the position \vec{r} is given by :

$$g_z(\vec{r}) = \sum_{i=1}^n g_z(\vec{r}, \vec{r}_i) \quad (3.12)$$

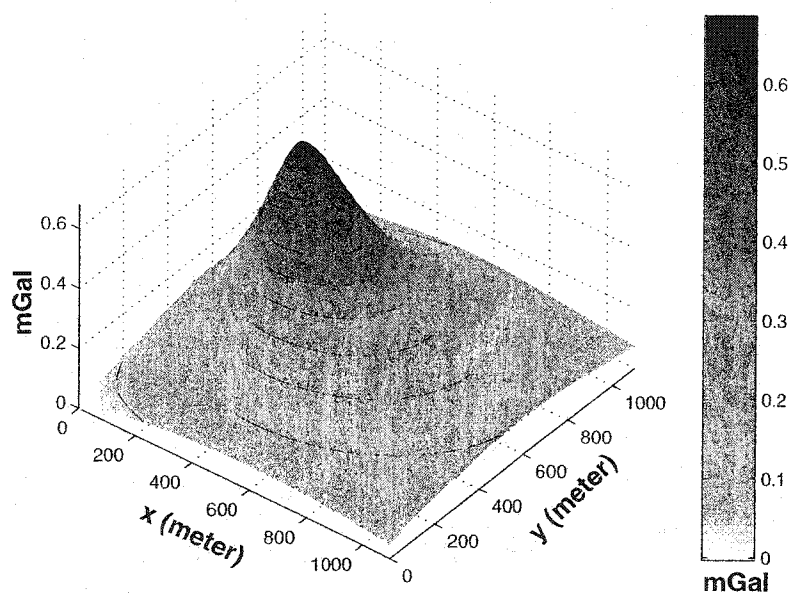
Because the vertical components of the gravity due to mass bodies are additive, equation 3.11 can be applied for any number of prisms and the sensitivity matrix A (matrix of kernels) is constructed line by line.

3.5.1 Dipping Dyke

The subsurface is discretized in a 3D grid made of elementary cubic prisms ($100 \times 100 \times 100$ meters). Dimensions of the modelled domain are $1.1 \times 1.1 \times 1.1$ Km representing 1331 cells. Figure 3.2 shows a 45° dipping short dyke with an uniform density contrast of 1000 kg/m^3 with respect to an homogeneous background.



(a)



(b)

Figure 3.2: (a) Model of dipping dyke ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) in homogeneous background; (b) surface modelled data.

We select this model (Li and Oldenburg, 1998; Boulanger and Chouteau, 2001) in order to test the performance of the algorithm to resolve depth, anisotropy and dip. The surface gravity response was computed using equation 3.11 at 121 sites. The data is located at the center of the top face of cells included in the first layer just below the ground surface. This configuration avoid singularity in the computation of the jacobian matrix. The range of values is 0.07 to 0.68 *mGal*. Assuming that data are uncorrelated, we use a diagonal data noise covariance matrix with $\sigma_d^2 = 0.1 \text{ (mGal)}^2$.

In order to improve the estimation of the variograms, we subdivide the grid in a cubic prisms of $50 \times 50 \times 50$ meters and assign the density corresponding to the initial dyke model. The experimental variograms in figure 3.3 yield an exponential covariance model in the dyke direction with a range of 700 meters and a sill of $21000 \text{ (kg/m}^3\text{)}^2$. We obtain an exponential model in the y-direction and in the direction perpendicular to the plane formed by the two first axes, respectively with a range of 250 and 200 meters. The nugget effect is null in the three directions. These modelled variograms leads to an exponential anisotropic covariance model with an average variance of $17200 \text{ (kg/m}^3\text{)}^2$. This model is used to calculate the covariance parameters matrix of the dyke.

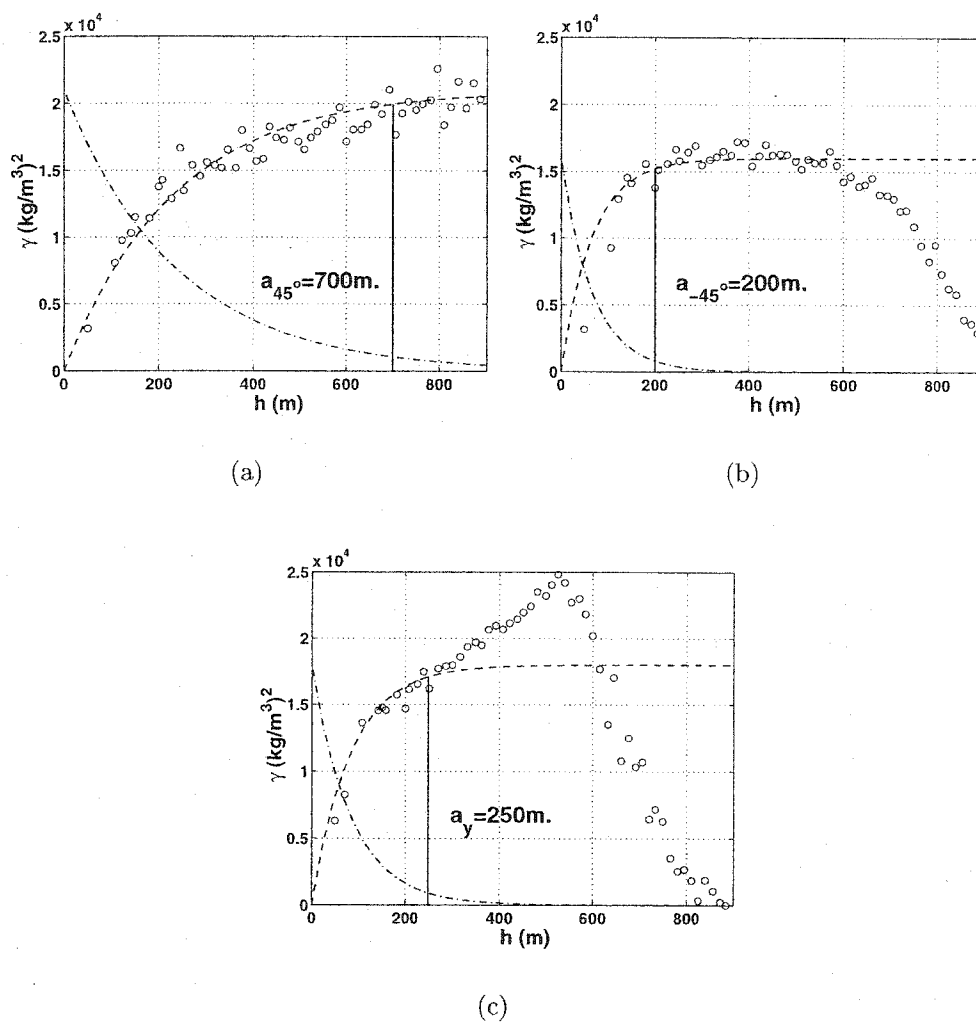


Figure 3.3: Variograms and covariograms for the dyke model. The experimental variograms fit an exponential model variogram. The range is 700 meters in the dyke direction (a), dipping 45° . In direction perpendicular to the dyke (b) and in the y axis direction (c), the range are respectively 200 and 250 meters

Figure 3.4 shows a comparison between the inverted models using no a priori information about the parameter model ($\mathbf{C}_p = \mathbf{I}$) and constrained by the previously modelled parameter covariance according to equation 3.4. Including a model of parameter covariance leads to a major improvement in the image reconstruction of the structure causing the gravity anomaly. The density contrast is also better estimated. The RMS error is 1.5 %. The shape and the density contrast of the dyke is not exactly recovered but the addition of the parameter covariance has allowed to retrieve the dip and the position of the dyke. The results from the inversion using an experimental \mathbf{C}_p doesn't provide exactly the same parameter covariances as the actual model. Nevertheless, as we compute variograms on the densities distribution of the solution (figure 3.5), we retrieve the anisotropy direction (along the dyke). The anisotropy (660/450) is less marked than the true anisotropy (700/250) and the sill is inferior ($2000 \text{ (kg/m}^3\text{)}^2$) to the sill of the actual model which can be explained by a less variability of solution parameters. For both cases, we use an homogeneous initial model with $\Delta\rho = 0 \text{ kg/m}^3$. Testing other initial models give good results as far as we use shallow initial model. In order to recover the synthetic model, we need also to introduce a density positivity constraint. There are many ways to constrain parameter positiveness. We use a simple technique : if a parameter computed is negative, this parameter is set to zero. Another way to force positiveness could be the use of a logarithmic barrier (Li and Oldenburg, 1996). In any case, the problem is not linear anymore with the model parameters and iterations are needed to converge to an acceptable solution. The parameter change is applied iteratively to update the initial model \mathbf{m}_0 until an optimal model is obtained. The solution is written, where k is the iteration number :

$$\mathbf{m}^{k+1} = \mathbf{m}^k + \mathbf{W}^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}^{-1} \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{W}^{-1} \mathbf{C}_p \mathbf{W}^{-1} \mathbf{A}^T + \mathbf{C}_d)^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}^k)) \quad (3.13)$$

We have selected three different criteria for stopping program iteration. The algorithm stops when anyone of these is reached. The first is a maximum number of iterations. The iterative algorithm also stops when each calculated response fits data within a tolerance (generally as small as possible). Finally, it stops when each parameter change reaches a pre-assigned small value.

As an example, a small prism ($100 \times 100 \times 100$ meters, $\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) is used as an initial model. It is located at $x=950 \text{ m}$, $y=550 \text{ m}$. and $z=150 \text{ m}$ and therefore its response is very different from the one observed. The inversion retrieves the dyke model (figure 3.6) in 27 iterations as well as when using an initial homogeneous model (one iteration).

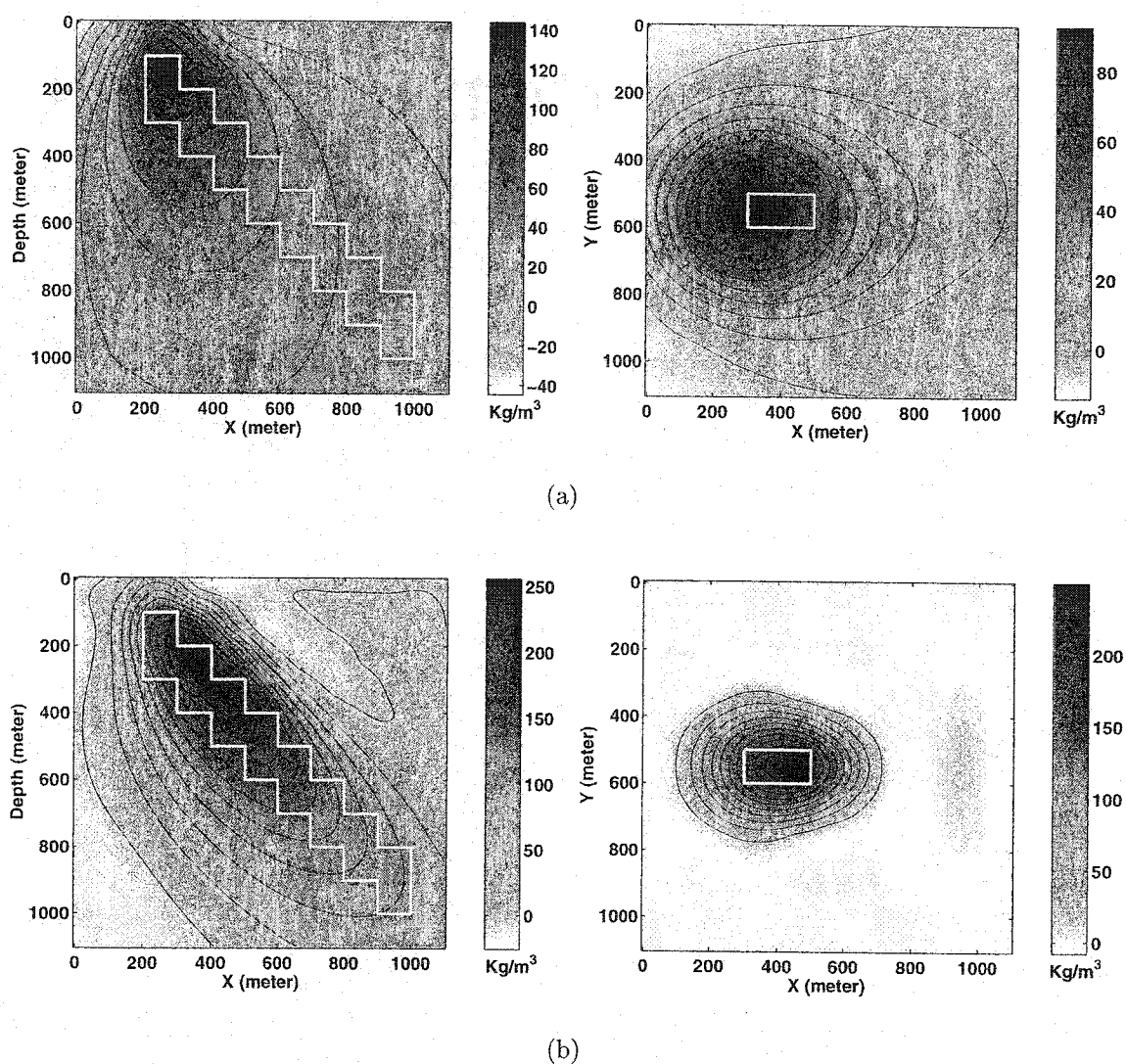


Figure 3.4: Dipping dyke : results of inversion using (a) $C_p = I$, and (b) using experimental C_p . Synthetic dyke is represented in solid white line.

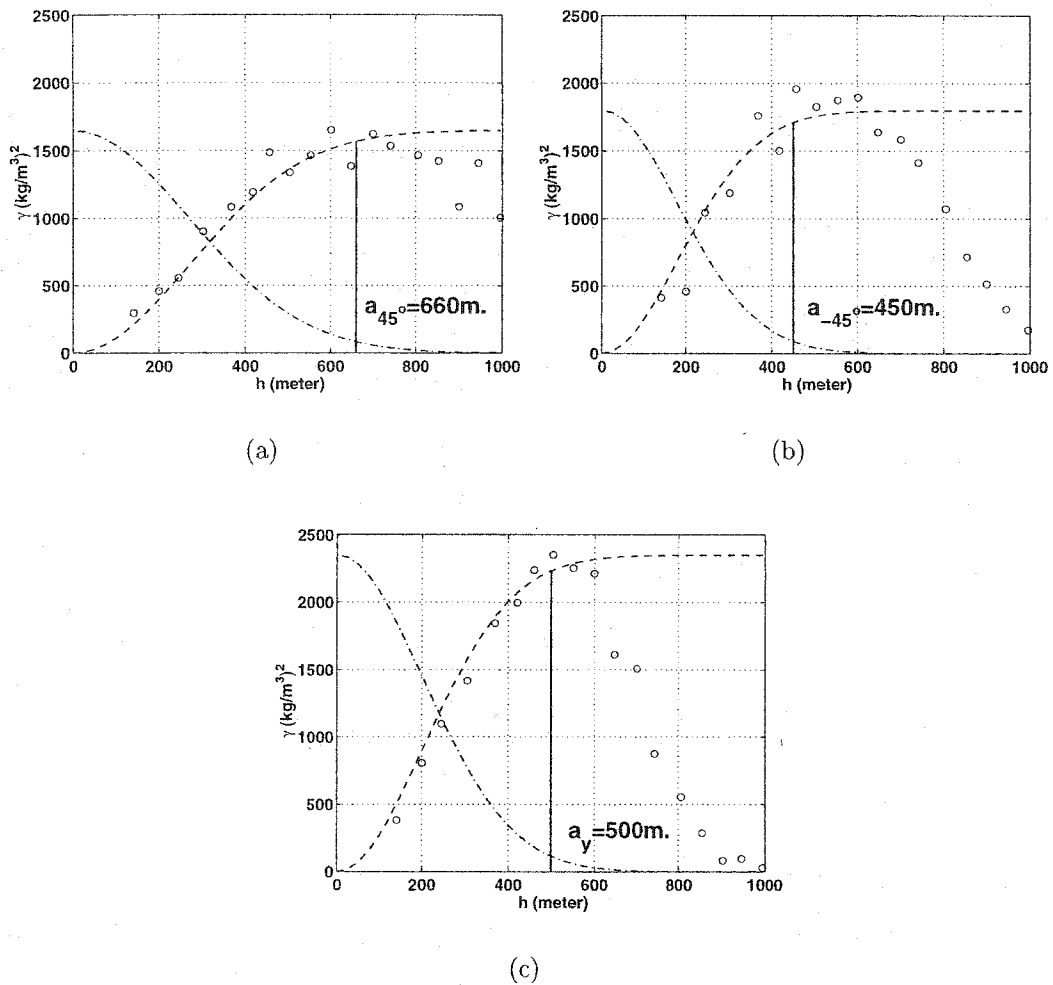


Figure 3.5: Variograms and covariograms of the density data obtained in figure 3.4b. The experimental variograms fit a gaussian model variogram. The range is 660 meters in the dyke direction (a), dipping 45° . In direction perpendicular to the dyke (b) and in the y axis direction (c), the range are respectively 450 and 500 meters

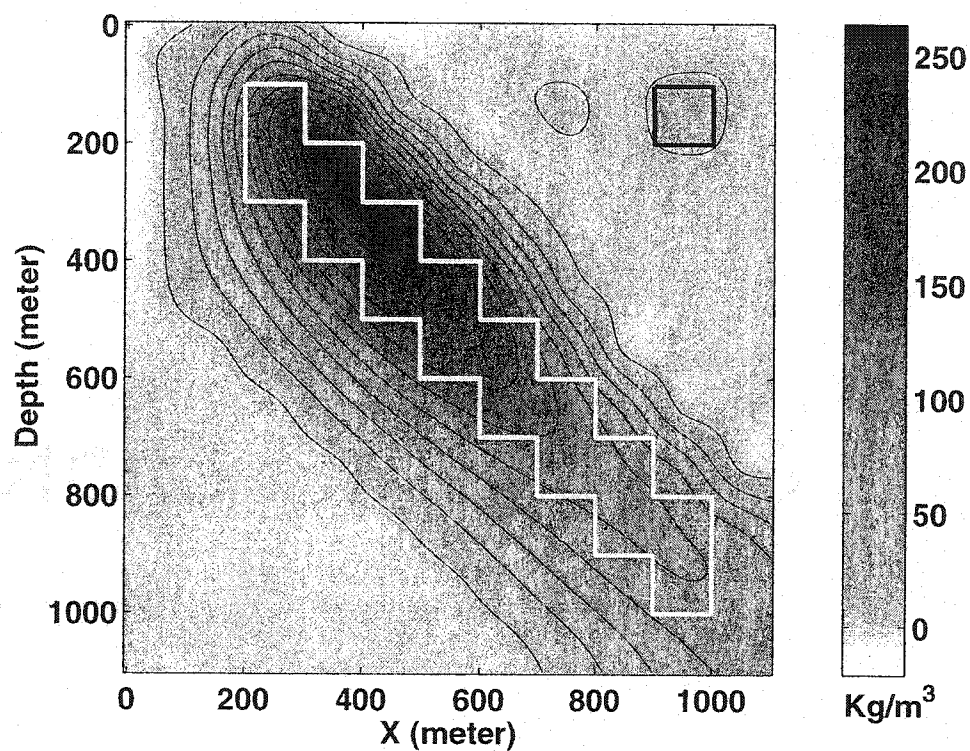


Figure 3.6: Dipping dyke : results of inversion using wrong initial model far from the ideal model. The section shown is along $Y=550$ meters. The ideal model ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) is drawn in solid white line and the initial model used ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) is a shallow cube drawn in solid black line in the right upper corner

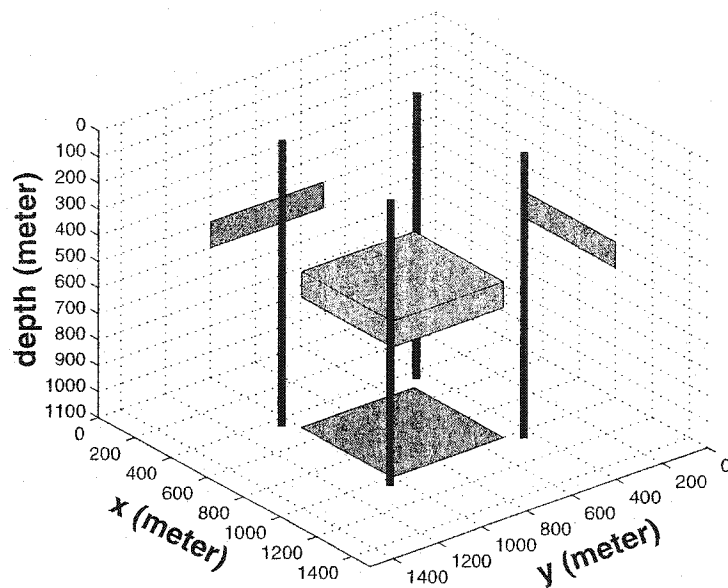
3.5.2 Horizontal plate

We will explore now the addition of gravity data at depth collected along boreholes. Figure 3.7 shows the model representing an horizontal plate of $500 \times 500 \times 100$ meters at a depth of 500 meters to the top. The density contrast between the plate and the host medium is 1000 kg/m^3 . The model domain has been divided into $15 \times 15 \times 11$ cubic cells of 100 meters side. Synthetic data include 225 surface data and 44 borehole data along four vertical boreholes represented with thin black line in figure 3.7. Borehole data are located at the center of cells intersected by the holes. The data noise variance is equal to $0.1 (\text{mGal})^2$. A parameter covariance model has been included. Like the dyke model, we subdivide the domain in a cubic prisms of $50 \times 50 \times 50$ meters and assign the density corresponding to the initial plate model. Modelling variograms in the x,y and z direction have respectively a range of 550, 550 and 130 meters, an average sill of $1.75 \times 10^4 (\text{kg/m}^3)^2$ and without nugget effect. The model which fits the experimental variograms is gaussian. The depth weighting matrix W as given in equation 3.3 is not needed here, because the vertical (depth) resolution is given by the gravity data along the boreholes. On the other hand, we need to penalize the estimated cell values with a great sensitivity, i.e. cells near the observations, either in surface or in boreholes. We use in this case another diagonal weighting matrix W in which the elements are the norm defined as (Li and Oldenburg, 1997) :

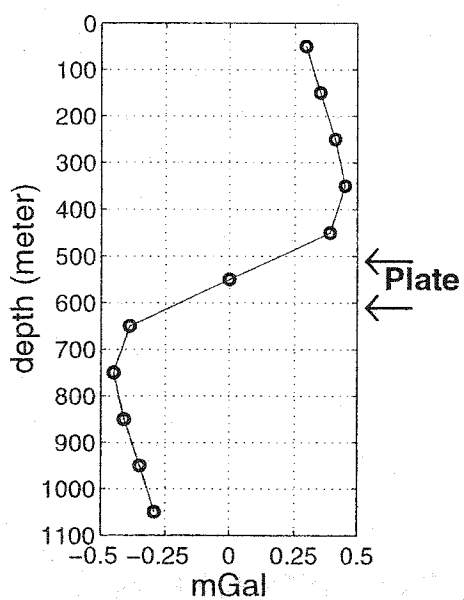
$$W_{j,j} = \frac{1}{n_d} \sqrt{\sum_{i=1}^{n_d} A_{i,j}^2} \quad j = 1, \dots, n_p \quad (3.14)$$

where n_d is the number of observations, n_p the number of parameters and \mathbf{A} the matrix of kernel functions. The advantage of the weighting matrix \mathbf{W} is to apply a smaller weight to deep cells near boreholes. It is a kind of mixed radial and depth weighting function.

Figure 3.8 shows a comparison between the solution with only surface data (a depth weighting is used) and solution with surface and borehole data (a norm weighting as equation 3.14 is used). Inversion using surface data only do not completely recover either the shape of the plate or the density contrast. Adding borehole data provide an improvement of the reconstruction of the plate. Depth of the plate is well resolved and shape of the model is well recovered. The mean error (RMS) is 1.5% in both cases.

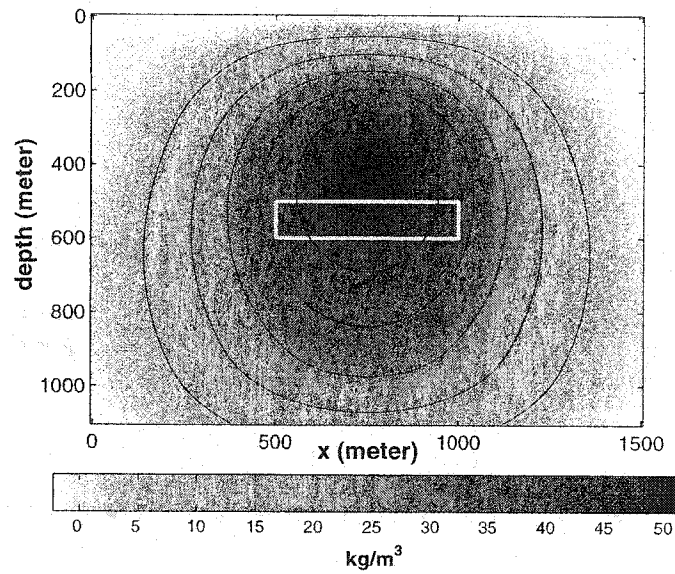


(a)

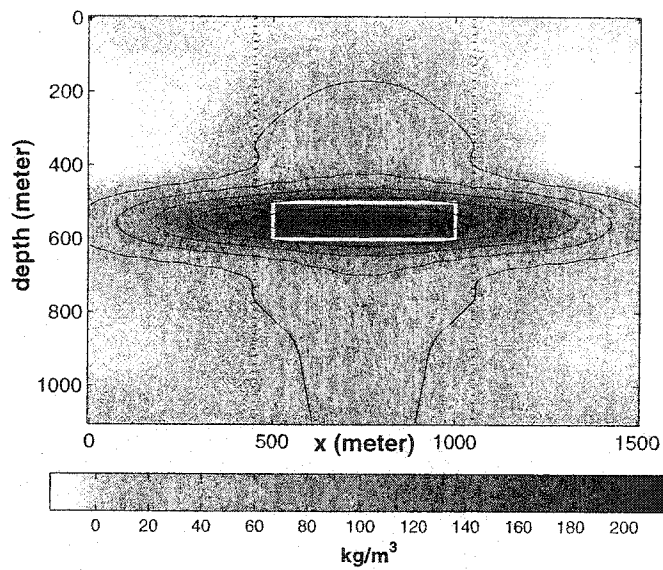


(b)

Figure 3.7: (a) Model of horizontal plate ($\Delta\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$). (b) Synthetic gravity data along one of the boreholes (drawn in solid black lines in the 3D model).



(a)



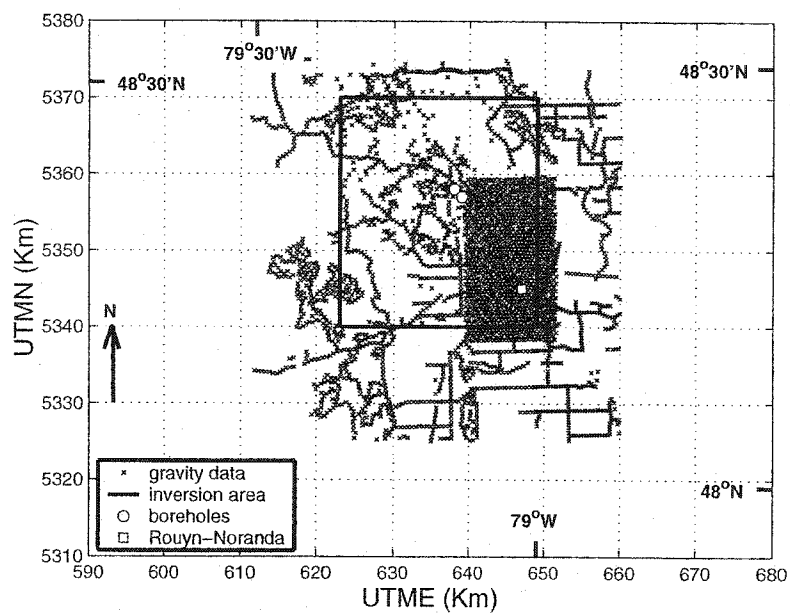
(b)

Figure 3.8: Model of horizontal plate : (a) results of inversion using only surface data with depth weighting and experimental C_p ; (b) results of inversion using surface+borehole data with a norm matrix (equation 3.14) and experimental C_p . Both figures represent vertical cross sections along $y=750$ m. Black dotted lines are the projections of the boreholes

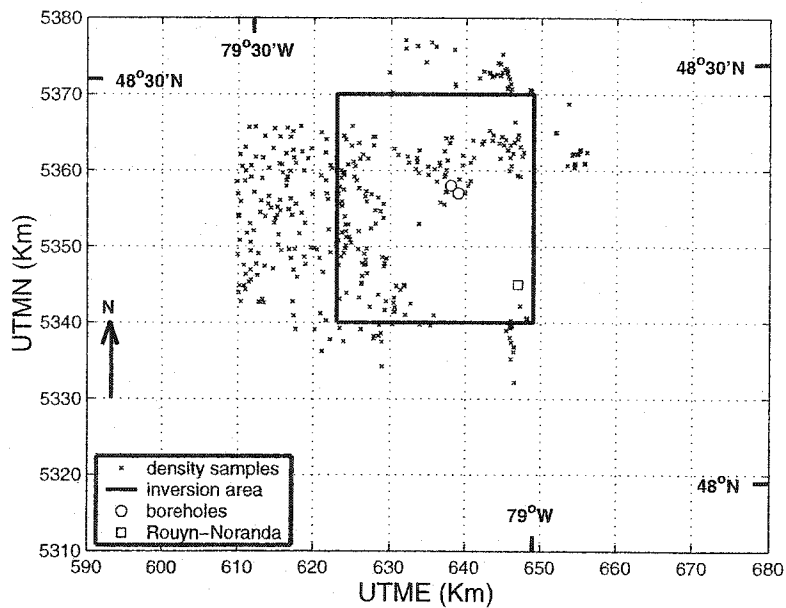
3.6 Field example

In Abitibi, the Blake River Group (BRG) has been surveyed intensively with geophysical methods mainly for mineral exploration purposes. The gravity data coverage in the Rouyn-Noranda mining camp is dense and uniform. However, it is not the case in the remaining part of the BRG, where data were mainly acquired in easily accessible sites such as roadsides and lakes. Figure 3.9 shows the distribution of the 3420 gravimetric data. 438 density data provided by cores from shallow boreholes and rock outcrops were also available to estimate the parameter covariance in the horizontal directions. The density samples varies from 2.16 g/cm^3 to 3.46 g/cm^3 . In addition, two deep boreholes (AN-51 and AN-67) in the vicinity of the Ansil deposit provided density data down to 945 m and 1627 m respectively. The observed density of the boreholes varies from 2.65 g/cm^3 to 3.07 g/cm^3 . The inversion algorithm presented here needs a regular data grid. Therefore the Bouguer anomaly was interpolated using kriging. The experimental variogram of the gravity data is modelled with an anisotropic gaussian model. The principal direction of anisotropy is $N45^\circ$, with a range ratio of $4000 \text{ m}/2800 \text{ m}$. The range of the Bouguer anomaly is -55 to -36 mGal (figure 3.10). The regional anomaly was obtained by upward continuation at 20 Km of the Bouguer anomaly in order to invert data on a grid until 10 km of depth. Subtracting the regional from the Bouguer anomaly results in the residual anomaly (figure 3.11) ranging between -9 to 8 mGal. We choose a data error variance equal to $0.1(\text{mGal})^2$ which is a realistic value for regional measurements.

The covariance parameters model is obtained from the experimental variograms of the density observations (figure 3.12), which are the same as obtained from density contrast. The model used is exponential. The principal direction is $N45^\circ$ with a range of 4800 m . The range in $N135^\circ$ direction is 2000 m . The average sill is $15000 (\text{kg/m}^3)^2$, the nugget effect is $5000 (\text{kg/m}^3)^2$.



(a)



(b)

Figure 3.9: (a) Gravity data from the region of Rouyn-Noranda and (b) density samples location. The town of Rouyn-Noranda is located in the lower right corner of the study area. Boreholes are located in the central part of the study area.

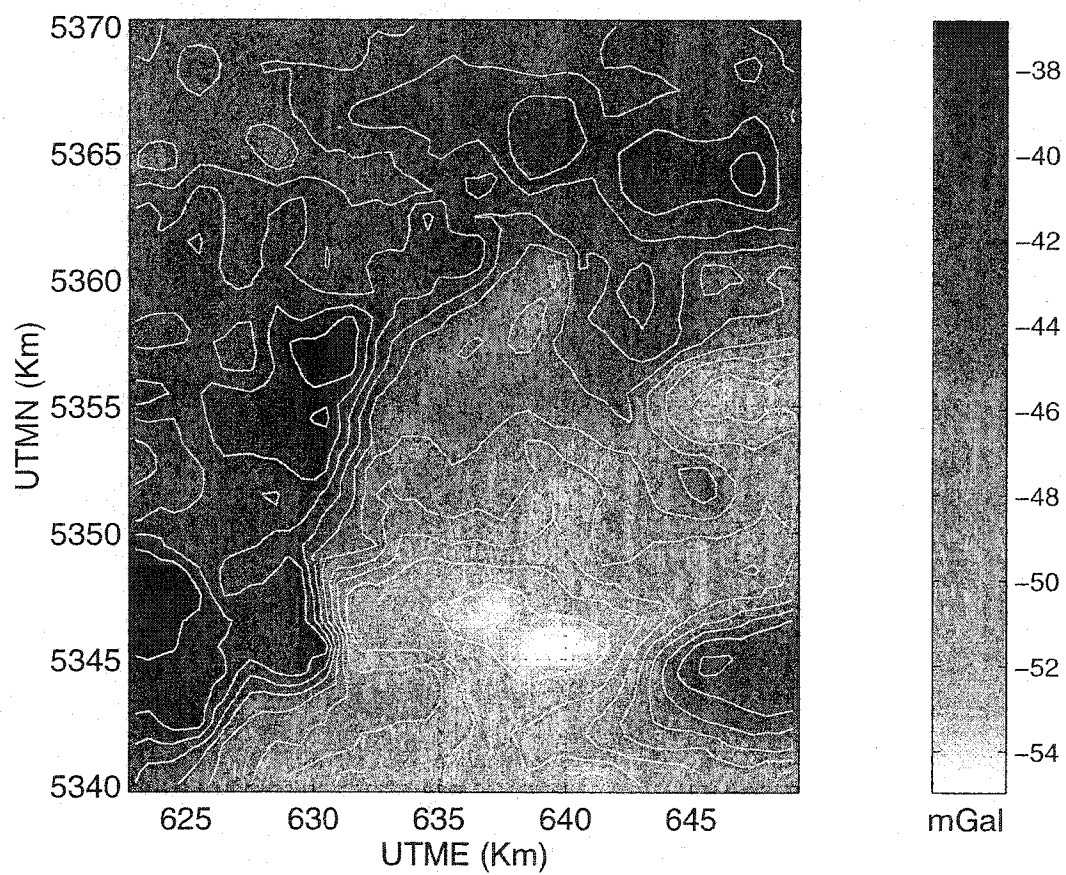


Figure 3.10: The Bouguer anomaly of the domain of inversion.

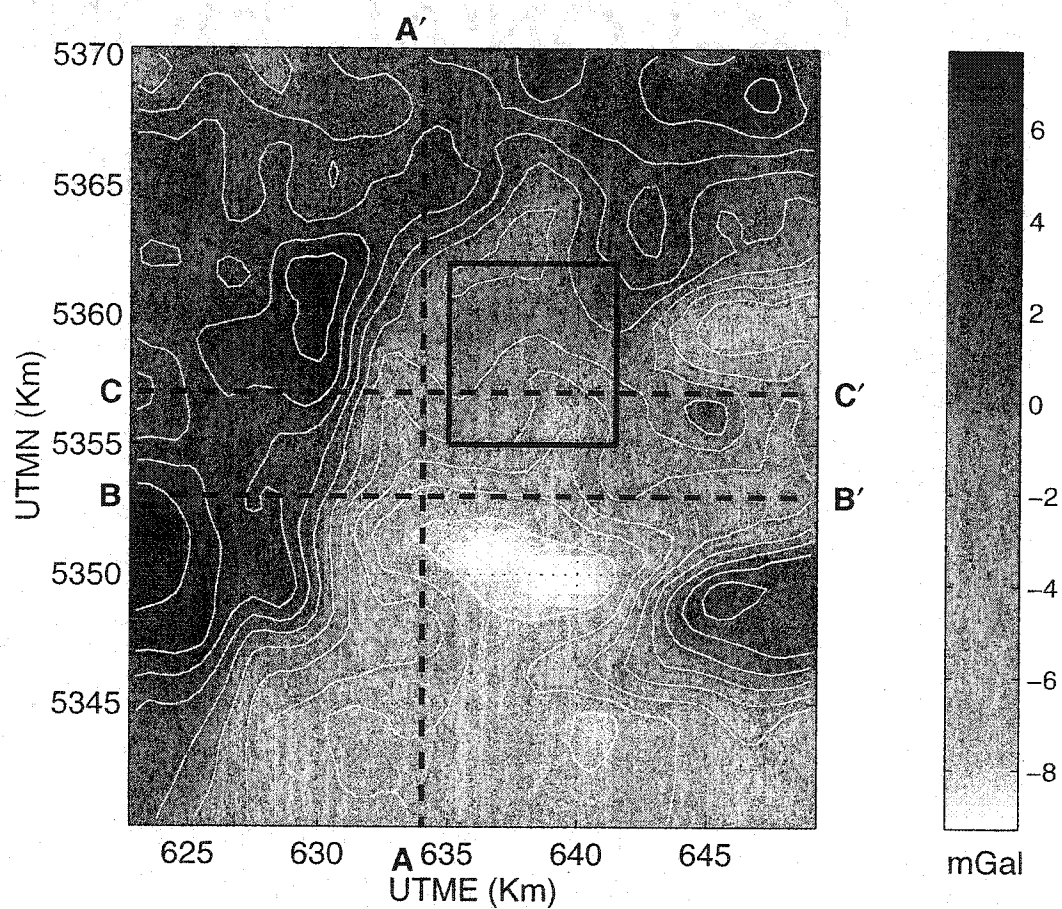
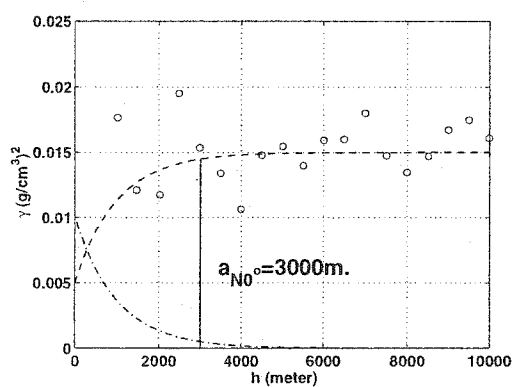
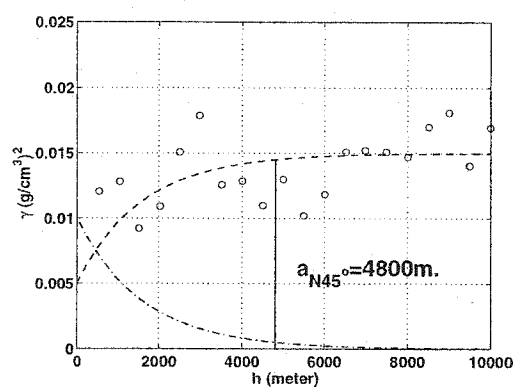


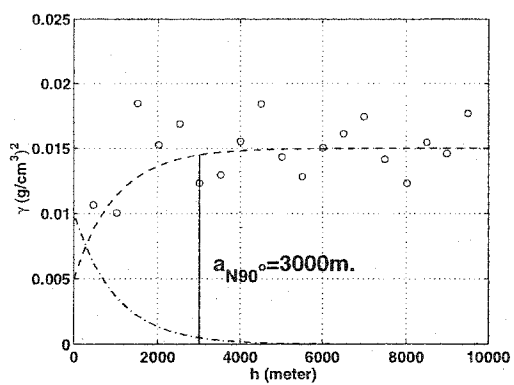
Figure 3.11: The residual gravity anomaly showing the location of profiles AA', BB', CC' and the domain of inversion (solid black line) using borehole densities (figure 3.15).



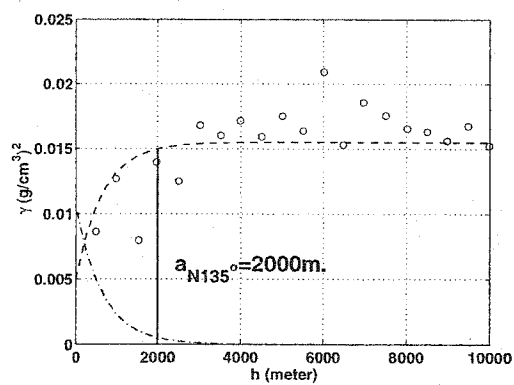
(a)



(b)



(c)



(d)

Figure 3.12: Variograms (dashed lines) and covariograms (dashed dotted lines) of surface densities. An exponential model of variogram is used.

The inversion domain dimensions are $26 \times 30 \times 10$ kilometers, divided into 1950 rectangular cells of $2 \times 2 \times 1$ kilometers side. The residual anomaly is resampled in order to keep a set of 195 surface data located above the center of the shallow cells. The mean error (RMS) is infinitely small ($10^{-13}\%$). Figures 3.13 and 3.14 show vertical density distribution sections from the modelled data. A background density of 2.82 g/cm^3 is employed, corresponding to an average composition of andesites with some rhyolitic layers (Deschamps et al., 1991; Bellefleur, 1992). The main bodies of the BRG can be identified. The north-south section AA' shows the extension of the Flavrian pluton (corresponding to the negative gravimetry anomaly in the central part of the domains). The depth of this intrusion do not exceed 3 km in the south part and 2 km in the north. The pluton is limited by metavolcanic rocks of the BRG. To the north end, the southernmost limit of the Timiskaming sedimentary rocks bordering the Porcupine-Destor fault is sensed. To the south, the paragneiss basement rock of the Pontiac ($\simeq 2.74 \text{ g/cm}^3$) is found at a depth of 5 km, dipping to the north (Deschamps and al., 1991). The Hunter Creek fault (HuCF) or the contact between the Flavrian intrusion and the mafic rocks west at the fault appears vertical (sections BB' and CC'). According to Boulanger and Chouteau (2001), the Flavrian pluton seems to extend to a depth of 6 km in its central part (section BB') to the east of the HuCF. Moreover, the Flavrian dips to the east. The dense and thick unit found on the western side of the HuCF could correspond to the mafic rocks around 2.9 g/cm^3 which give a high gravity anomaly (Deschamps and al., 1991). The Dufault granitoid intrusive appearing to the extreme east of the section BB' corresponds to the thin shallow (2 km) batholythe described by Keating (1996). As shown on the section CC', the Flavrian pluton becomes thinner in its northern part (Bellefleur, 1992).

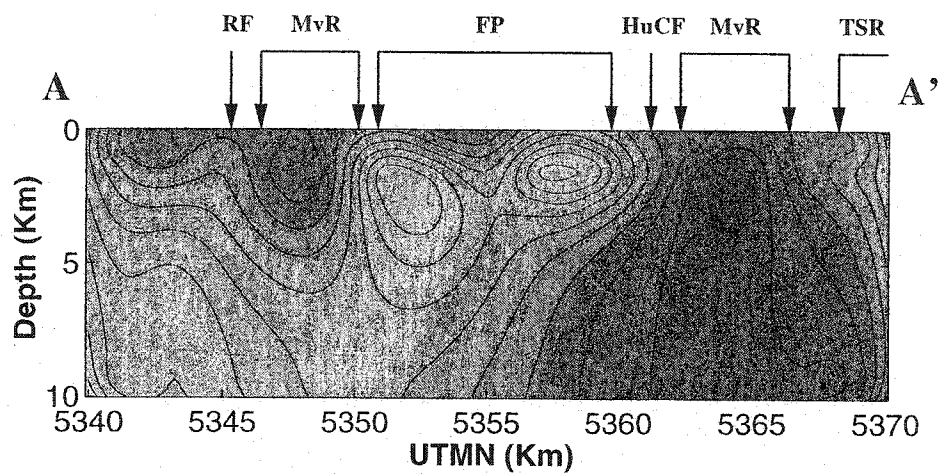
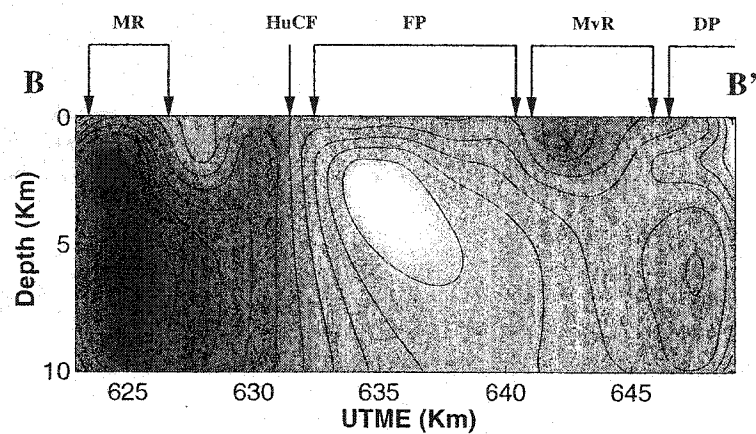
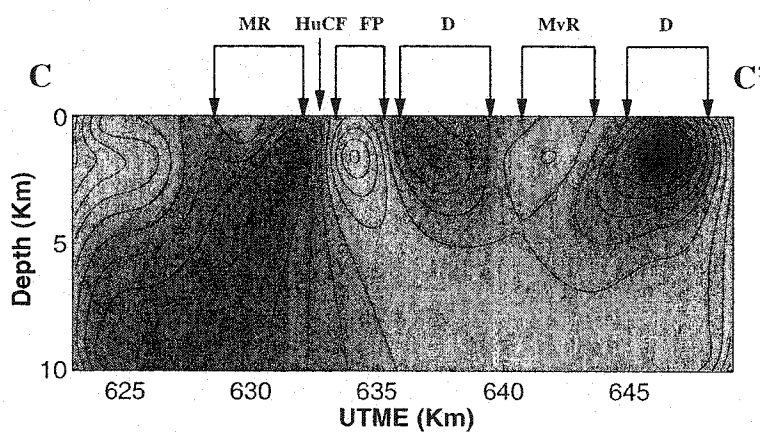


Figure 3.13: Density sections of the BRG at UTME=634000 (north-south). The position is indicated on the residual gravity in map figure 3.11. FP =Flavrian Pluton. MvR=Metavolcanic Rocks. TSR=Timiskaming Sedimentary Rocks. RF=Rouyn Fault. HuCF=Hunter Creek Fault.



(a)

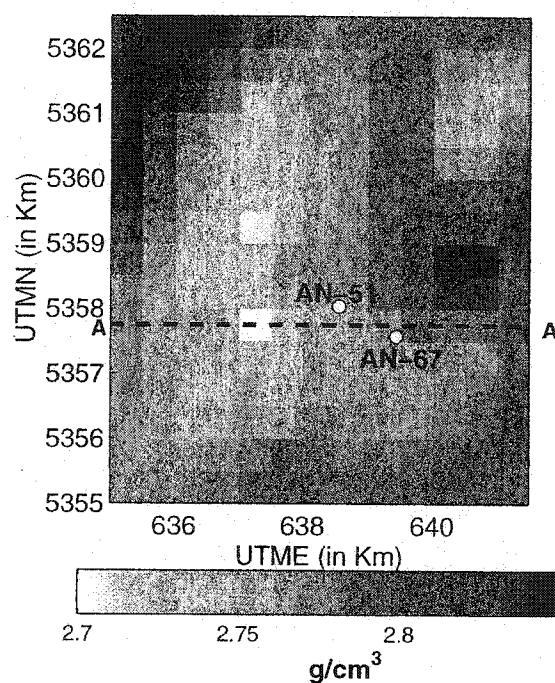


(b)

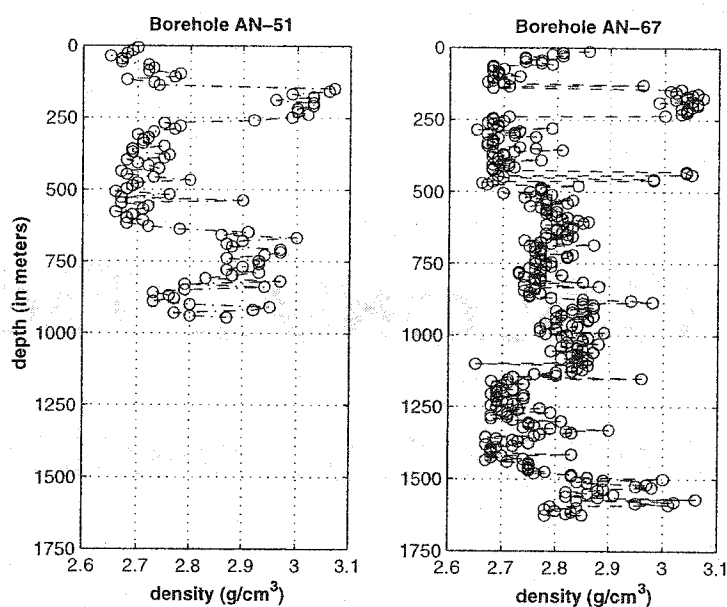
Figure 3.14: Density sections of the BRG at (a) UTMN=5353000 (east-west) and (b) UTMN=5357000 (east-west). Their positions are indicated on the residual gravity in map figure 3.11. FP=Flavrian Pluton. DP=Dufault Pluton. MvR=Metavolcanic Rocks. MR= Mafic Rocks. D= Diorite. HuCF= Hunter Creek Fault.

A more detailed inversion (0-2 km depth) in the BRG area includes surface and borehole density data. The residual anomaly used for the inversion is obtained by an upward continuation to 4 km of the original Bouguer anomaly. The cells are $500 \times 500 \times 250$ meters in a zone delimited by 635000 – 641500 UTME and 5355000 – 5362000 UTMN. The kriged surface densities are interpolated on a regular grid of 500×500 meters and assigned to surface cells (figure 3.15a). Surface densities are contained in the interval $2.7 - 2.85 \text{ g/cm}^3$. Borehole density sampling is dense (figure 3.15b) and an arithmetical average density value is computed for each cell intersecting by the holes. The range in the vertical direction is 160 m for AN-51 borehole and 120 m for AN-67 (figure 3.16). Figure 3.17 shows a comparison of two sections obtained without density constraints and with surface+boreholes density constraints. Without density constraint, RMS error is infinitesimal while is 2.3% with density constraints. Fixed densities are obtained by multiplying the appropriate δm terms (added to m_0 to provide a solution m) by zero. Fixing surface and borehole densities provide more density contrast (0.39 g/cm^3) than no density constraints (0.26 g/cm^3). In the case where no densities are fixed, the Flavrian pluton has a density of 2.72 g/cm^3 and extends to a depth of 2.5 kilometers along this EW cross section. The dioritic unity bordering the Flavrian to the east reach a density of 2.98 g/cm^3 . With density constraints, the Flavrian appears more complex, less dense (2.68 g/cm^3) and extends deeper. On the other hand, diorites are more dense (3.06 g/cm^3). These density values are consistent with the values used by Deschamps et al. (1991) (2.65 g/cm^3 for the Flavrian and $2.95 - 3 \text{ g/cm}^3$ for diorite) and by Bellefleur (1992) ($2.65 - 2.7 \text{ g/cm}^3$ for the Flavrian and 2.9 g/cm^3 for diorite). Note that the Flavrian has a larger dip to the east (40°) with the added density constraints than without (10°). It is known from geological mapping and borehole information that the Flavrian dips to East at 30° approximately (Verpaelst et al.,

1995).



(a)



(b)

Figure 3.15: (a) Surface and (b) boreholes density data. The location of profiles AA' and boreholes is shown.

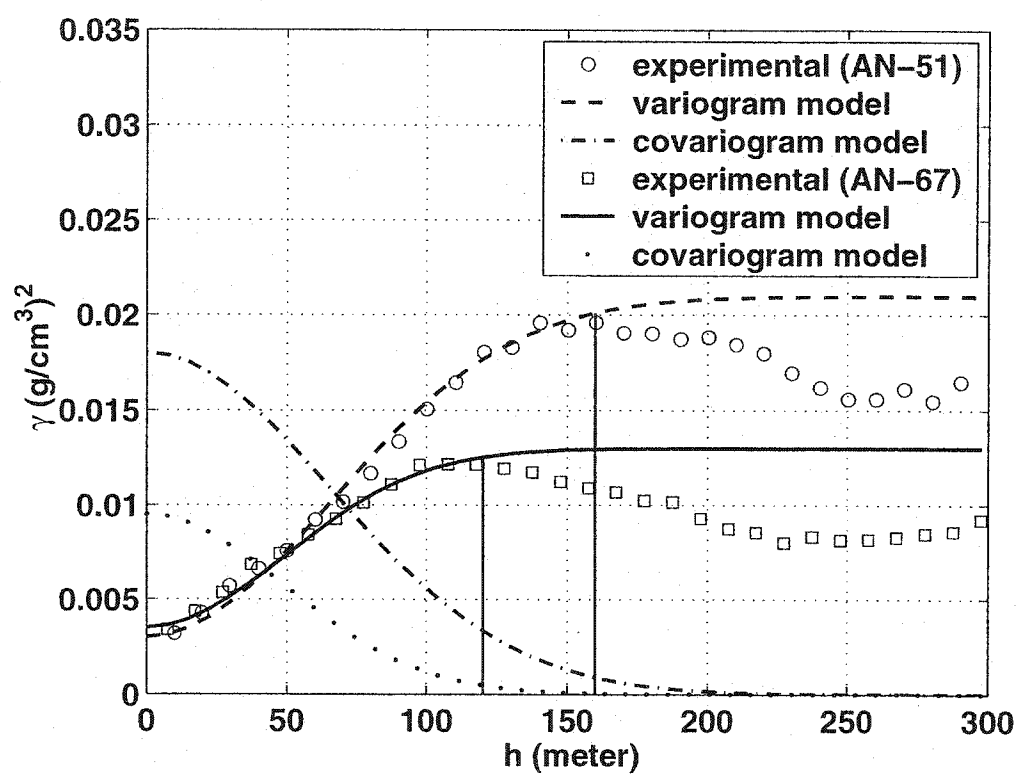
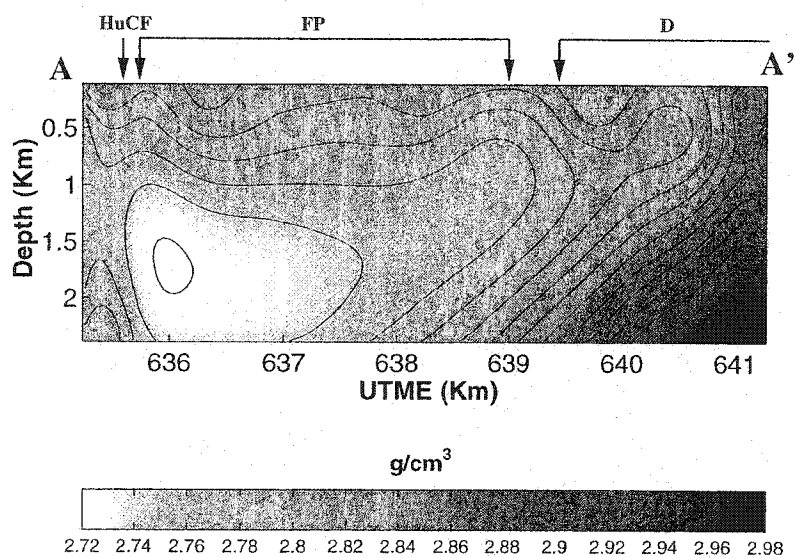
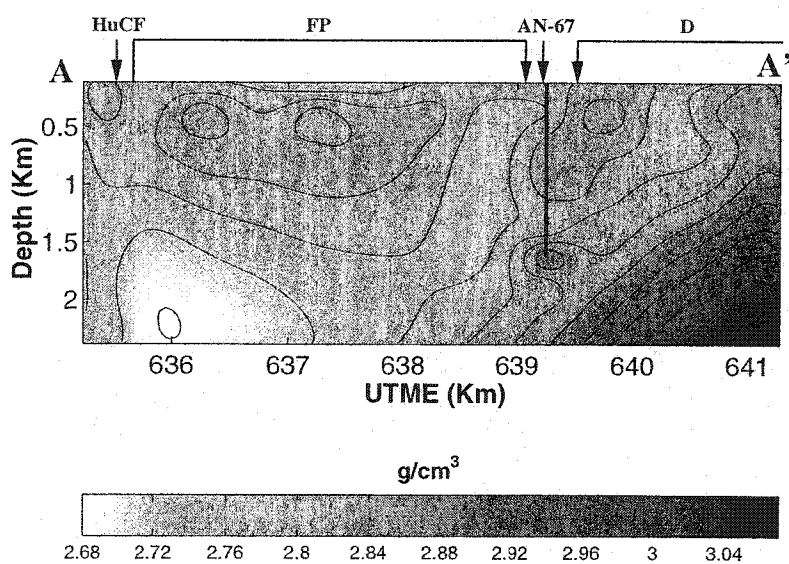


Figure 3.16: Variograms and covariograms of AN-51 and AN-67 borehole densities. Gaussian models are used for the variograms.



(a)



(b)

Figure 3.17: Comparison of models obtained from inversion (a) without density constraints, and (b) using surface+borehole densities. Both sections (UTMN=5357750) are shown in the surface density map (figure 3.15a). FP=Flavrian Pluton. D=Diorite. HuCF=Hunter Creek Fault. The AN-67 borehole is drawn in thick black line

3.7 Discussion and conclusion

There are different ways of estimating the parameter covariance matrix. It can be directly estimated from density data (surface and/or borehole) if sufficiently available. If no density data are available, it can be estimated from existing geologic data as it is done in figure 3.2a where a body with an assumed geometry is the target of the gravity survey. In one region, geological data may model the subsurface say as dipping extensive layers or as large isometric masses in a regional background (batholiths) with expected sizes. Finally, it can be indirectly estimated from the gravity data, by using the relationship between the data covariance and the parameter covariance as proposed by Asli et al. (2000). The selected parameter covariances guide the determination of the subsurface density model; a wrong estimate of the covariances will lead to a wrong inverted density model. The algorithm depends on the geometry of the density structure. If the subsurface model is complex including structures of various geometries (layers, 2D and 3D of different sizes) it is difficult to design an a priori parameter covariance model that would respect each of the geometries. In that case it is recommended to use a covariance model deducted from the data covariance (see Asli et al., 2000). For data collected on the ground surface we use depth weighting to retrieve bodies at some depths. This depth weighting is not needed if borehole gravity data are available; depth resolution is drastically improved and a norm weight is used instead. The computer code that is developed from the here-described 3-D constraint inversion algorithm is written in MATLAB code. It has been made flexible in order to accept variable input parameters for different constraints such as surface and/or borehole data, data error and parameters covariance (model type, anisotropy, rotation angle), depth weighting or norm weighting and density positivity. Also densities can be freezed where known on ground surface or along boreholes. The inversion is not sensitive to the choice of the initial density

model and in general an homogeneous ground will be used as an initial model. The estimation of the covariance parameter matrix \mathbf{Cp} requires about half of the CPU time for inversion and large memory. Inverting a grid of 2300 cells using 230 gravity data will need 80 Mb of memory and run approximately for an hour on a Sparc 20 Machine (Sun).

3.8 Acknowledgments

We are grateful to Gilles Bellefleur (Ecole Polytechnique de Montréal, QC) for providing his own density measurements from surface outcrops in the Rouyn-Noranda area. We would like to thank Denis-Jacques Dion from the Ministère des Ressources Naturelles du Quebec for making available the density data from boreholes AN-57 and AN-61 (Ansil deposit, Abitibi) and Olivier Boulanger (Ecole Polytechnique) for the kriging of the Bouguer anomaly. We would like to acknowledge the constructive comments from the two anonymous reviewers. Financial support for the research and one of the authors (P.C.) was provided from a NSERC strategic grant # STR0181406.

3.9 Appendix

Given an ellipsoid centered in a reference axes system, the equation of the ellipsoid can be defined as :

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1 \quad (3.15)$$

For an ellipsoid with ranges a_x , a_y and a_z along the three references axes, it can

be defined, introducing the range $a_{(\alpha,\theta)}$ (see figure below) :

$$\frac{(a_{(\alpha,\theta)} \cos \alpha \cos \theta)^2}{a_x^2} + \frac{(a_{(\alpha,\theta)} \cos \alpha \sin \theta)^2}{a_y^2} + \frac{(a_{(\alpha,\theta)} \sin \alpha)^2}{a_z^2} = 1 \quad (3.16)$$

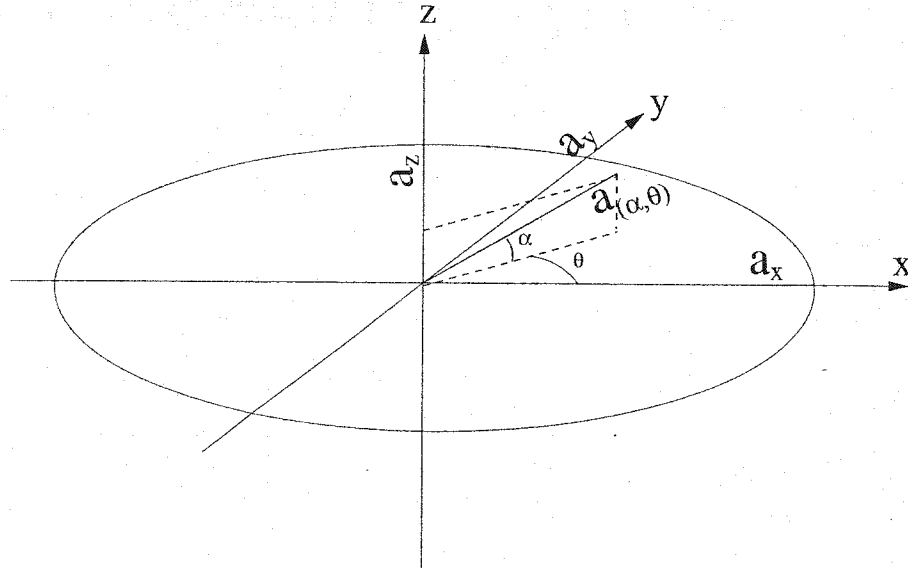


Figure 3.18: Ellipsoid with ranges equal to a_x , a_y and a_z respectively along the three main axes.

The relation in (3.9) is then found.

3.10 References

- Asli, M., Marcotte, D. and Chouteau, M., 2000. Direct inversion of gravity data by cokriging. Geostat2000, Cape Town, South Africa.
- Barbosa, V.C.F., Silva, J.B.C. and Medeiros, W.E., 1999. Stable inversion of gravity anomalies of sedimentary basins with non smooth basement reliefs and arbitrary density contrast variations. Geophysics, 63 :754-764.
- Bellefleur, G., 1992. Contribution of potential field methods to the geological mapping and study of deep structures in the Blake River Group, Abitibi. Master thesis.

- Ecole Polytechnique de Montréal (In French).
- Blakely, R.J., 1995. Potential theory in gravity and magnetic applications. Cambridge University Press.
- Boulianger, O., Chouteau, M., 2001. Constraints in 3D gravity inversion. *Geophysical prospecting*, 49 :265-280
- Braille, L.W., Keller, G.R. and Peeples, W.J., 1974. Inversion of gravity data for two-dimensional density distribution. *J. Geophys. Res.*, 79, 2017-2021.
- David, M., 1977. Geostatistical ore reserve estimation. Elsevier Scientific Pub. Co., 364p.
- Deschamps, F., Chouteau, M. and Dion, D.-J., 1996. Geological interpretation of aeromagnetic and gravimetric data in the western part of Rouyn-Noranda. In *Etudes géophysiques récentes de certains secteurs de la ceinture volcanosédimentaire de l'Abitibi*. M. Germain Editor. DV 93-10 : 78-130 (In French)
- Deutch, C.V. and Journel, A.G., 1992. Geostatistical Software Library and User's Guide. Oxford University Press.
- Fedi, M. and Rapolla, A., 1999. 3-D inversion of gravity and magnetic data with depth resolution. *Geophysics*, 64 :452-460
- Guillen, A. and Menichetti, V., 1984. Gravity and magnetic inversion with minimization of a specific functional. *Geophysics*, 49 :1354-1360
- Green, W.R., 1975. Inversion of gravity profiles by use of a Backus-Gilbert approach. *Geophysics*, 40 :763-772
- Keating, P., 1996. Interpretation of the gravity anomaly field in the Noranda - Val d'Or region. In *Etudes géophysiques récentes de certains secteurs de la ceinture volcanosédimentaire de l'Abitibi*. M. Germain Editor. DV 93-10 : 57-76. (In French)
- Last, B.J. and Kubik, K., 1983. Compact gravity inversion. *Geophysics*, 48 :713-721
- Lee, T.-C. and Biehler, S., 1991. Inversion modeling of gravity with prismatic mass bodies. *Geophysics*, biased linear estimation, and nonlinear estimation. *Techno-*

- metrics, vol.12, n°3.
- Li, Y. and Oldenburg, D.W., 1996. 3-D inversion of magnetic data. *Geophysics*, 61 :394-408
- Li, Y. and Oldenburg, D.W., 1998. 3-D inversion of gravity data. *Geophysics*, 63 :109-119
- Marcotte, D., 2002. Equivalences between various estimators used in inversion. Personal communication. (In French)
- Matheron, G., 1969. Course of geostatistics. In *Les cahiers du centre de morphologie mathématique de Fontainebleau*, fascicule 2. Ecole nationale supérieure des mines de Paris. (In French).
- Meju, M.A., 1994. *Geophysical Data Analysis : Understanding Inverse Problem Theory and Practice*. Course Notes Series. S.N. Domenico, Editor, 6. Society of Exploration Geophysicists.
- Meju, M.A. and Hutton, V.R.S., 1992. Iterative most-squares inversion : application to magnetotelluric data. *Geophys.J.Int.*, 108 :758-766
- Menke, W., 1984. *Geophysical data analysis : discrete inverse theory*. Orlando, Fla : Academic Press.
- Montagner, J.-P. and Jobert, N., 1988. Vectorial tomography-II. Application to the Indian Ocean. *Geophys. J. Roy. Ast. Soc.*, 94 :309-344
- Nagy, D., 1966. The gravitational attraction of a right rectangular prism. *Geophysics*, 31 :362-368
- Oldenburg, D.W., 1974. The inversion and interpretation of gravity anomalies. *Geophysics*, 39 :526-536
- Pilkington, M., 1997. 3-D magnetic imaging using conjugate gradients. *Geophysics*, 62 :1132-1142
- Pilkington, M. and Todoeschuck, J.P., 1991. Naturally smooth inversions with a

- priori information from well logs. *Geophysics*, 56 :1811 :1818
- Sen, M. and Stoffa, P.L., 1995. *Global Optimization Methods in Geophysical Inversion*. series editor : A.J. Berkhout. Elsevier.
- Tarantola, A. and Valette, B., 1982. Generalized nonlinear inverse problems solved using the least squares criterion. *Review of Geophysics and Space Physics*, 20 :219-232
- Verpaelst, P., Peloquin, A.S., Adam, E., Barnes, A.E., Ludden, J.N., Dion, D.-J., Hubert, C., Milkereit, B. and Labrie, M., 1995. Seismic reflection profiles across the "Mine Series" in the Noranda camp of the Abitibi belt, Eastern Canada. *Can. J. Earth Sci.*, 32, 167-176

Chapitre 4

Discussion

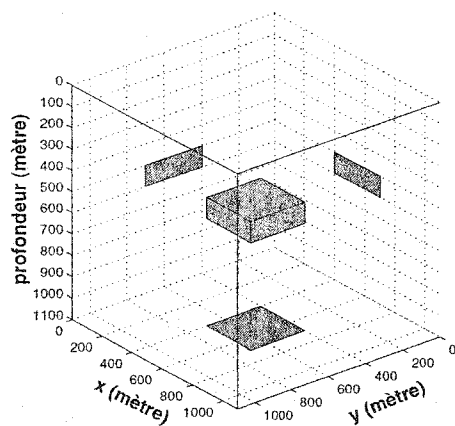
La discussion portant sur la méthode d'inversion a déjà été présentée dans l'article, dans le chapitre précédent. On traitera, dans ce chapitre, quelques problèmes particuliers concernant les limites de cette méthode.

4.1 à propos de forages

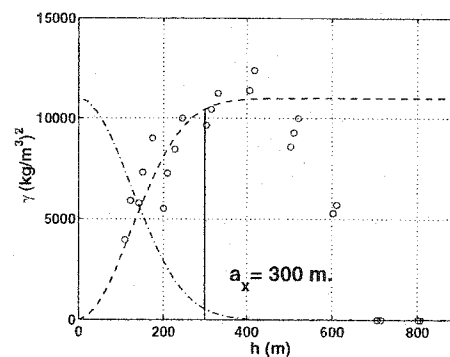
Nous avons vu, dans le chapitre précédent, un cas synthétique simulant un modèle de plaque horizontale avec inclusion de données de quatre forages. L'inversion donnait de bons résultats car les forages étaient suffisamment proche de la plaque. Considérons maintenant un domaine 3D discrétisé de $1.1 \times 1.1 \times 1.1$ kilomètres avec une plaque de dimension égales à $300 \times 300 \times 100$ mètres localisée au centre du domaine (figure (4.1 a)). Pour l'inversion, le domaine est discétisé en cellules de $100 \times 100 \times 100$ mètres. Pour avoir une meilleure précision sur les variogrammes, on discrétise plus finement le modèle en cellules de $50 \times 50 \times 50$ mètres. les modélisations des variogrammes expérimentaux (figure 4.1 b,c et d) donnent des portées de 300, 300 et 130 mètres respectivement calculées dans les directions principales x, y et z. Ces portées sont représentatives des dimensions de la plaque. Les modèles adoptés

sont gaussiens. Le palier moyen est de $10^4 \text{ (kg/m}^3\text{)}^2$ et l'effet de pélite est nul dans les trois directions. On propose de fixer la variance des erreurs sur les données à $\sigma_d^2 = 0.1 \text{ (mGal)}^2$. On obtient une solution représentée en figure (4.2). Dans ce cas, les forages sont éloignés de la source (700 mètres du centre de la plaque). La distribution des densités s'avère être diluée, même si les localisations en x,y et z de la plaque sont retrouvées. Les données prises le long des forages n'influencent que très faiblement la répartition des densités.

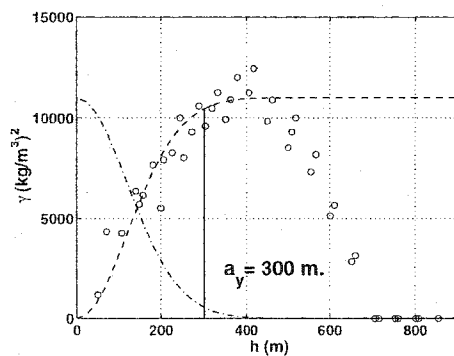
Avec des forages plus rapprochés de la plaque (figure 4.3 a)), le résultat de l'inversion donne une meilleure résolution de celle-ci. Les figures (4.3 b et c) montre le résultat de l'inversion avec des forages à 283 mètres du centre de la plaque. La forme de la plaque est restituée mais le contraste de densité ne dépasse pas 100 kg/m^3 . Une inversion effectuée sans les données de surface a donné des résultats similaires : les forages sont suffisamment proches de la plaque pour jouer un rôle prépondérant dans la minimisation. Avec des forages interceptant la plaque (figure (4.4 a)), la résolution de la forme de la plaque et de son contraste de densité sont très largement améliorées (figure (4.4 b et c)). Le contraste de densité atteint un maximum de 778 kg/m^3 . Si on prend un seul forage vertical passant au centre de la plaque (figure (4.5 a)), alors la restitution de la plaque est quasi-parfaite (figure (4.5 b et c)). La solution donne un maximum du contraste de densité égal à 1020 kg/m^3 , très proche du contraste réel. Ces résultats montrent la limite de l'apport de données de forages. En effet, si la résolution est très bonne lorsque les forages sont près ou interceptent le corps cherché, il n'en est pas de même lorsque ceux-ci sont éloignés du corps.



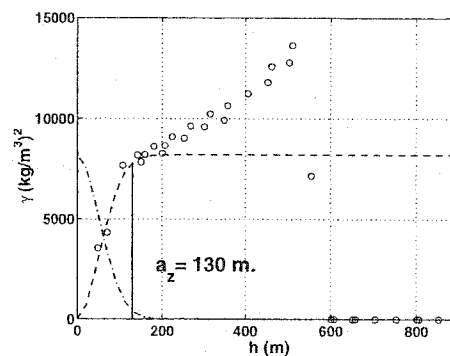
(a) Modèle de plaque ($300 \times 300 \times 100$ mètres)



(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe x

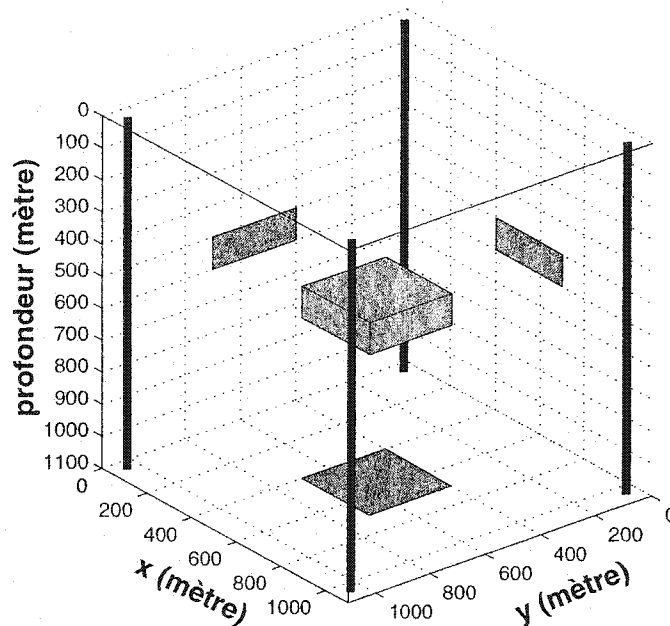


(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe y

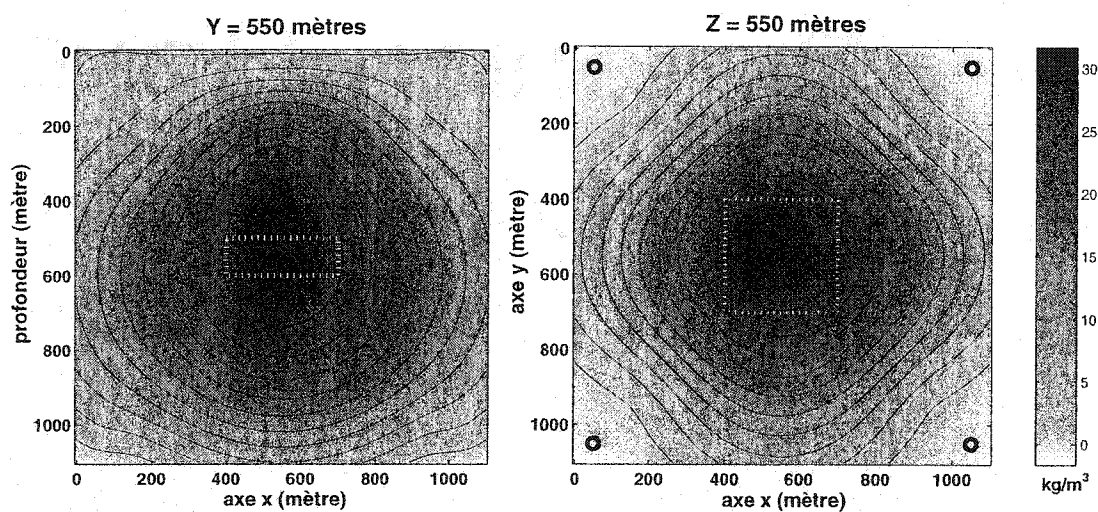


(d) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe z

Figure 4.1: Modèle de plaque horizontale de dimension $300 \times 300 \times 100$ mètres et les variogrammes calculés dans les trois directions principales x,y et z



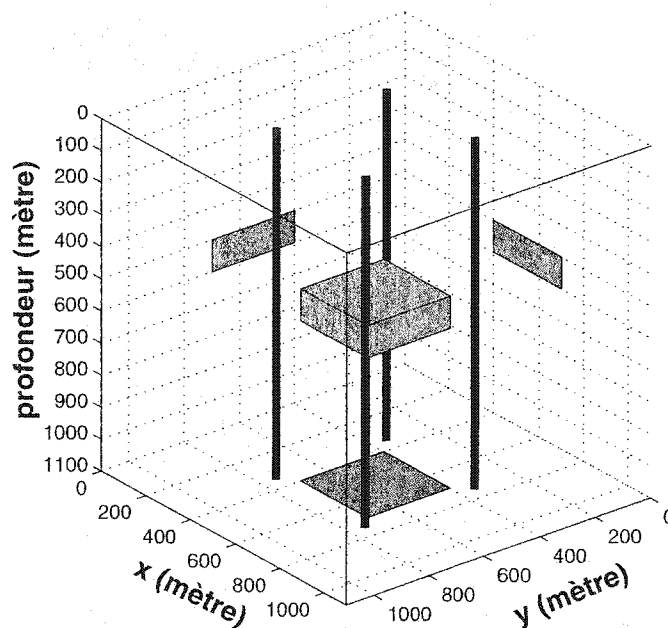
(a) Modèle avec position des forages en trait noir



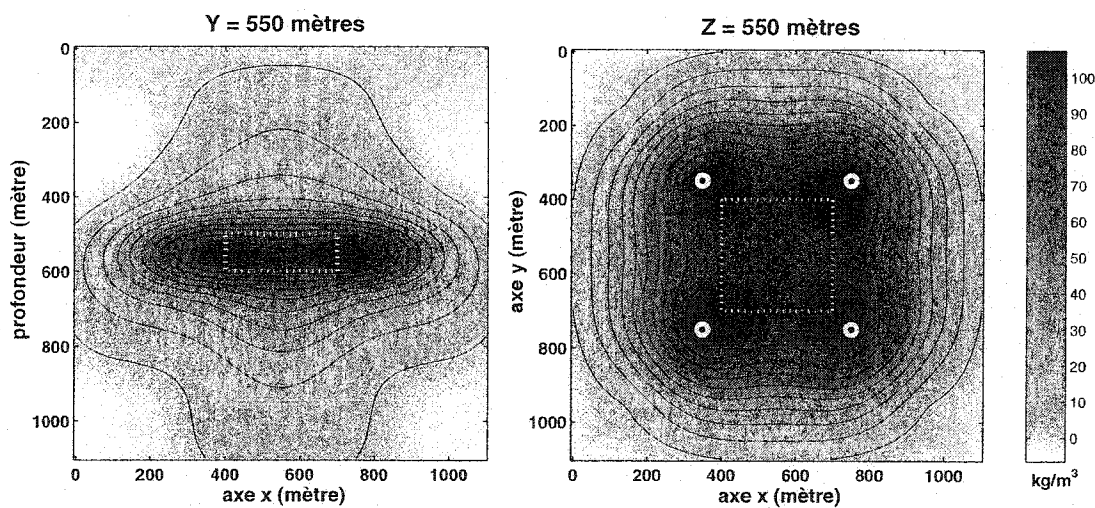
(b) Résultat de l'inversion en coupe Y=550 m.

(c) Résultat de l'inversion en plan Z=550 m.

Figure 4.2: Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages situés à 700 mètres du centre de la plaque.



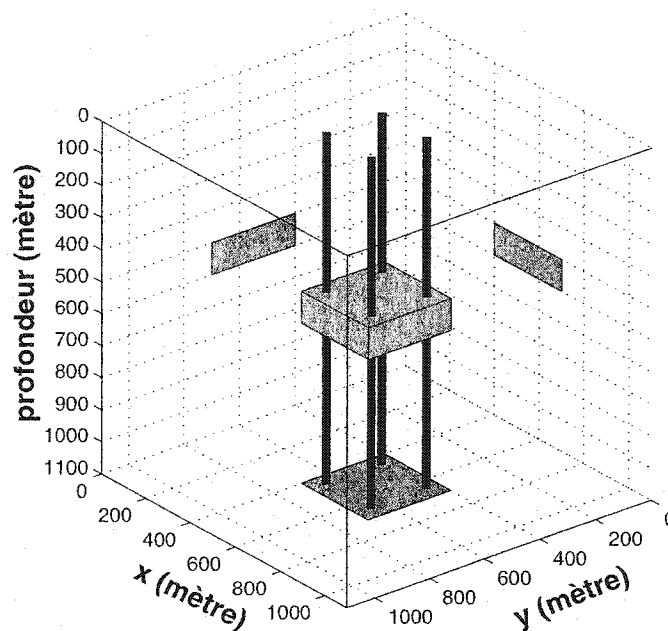
(a) Modèle avec position des forages en traits noirs



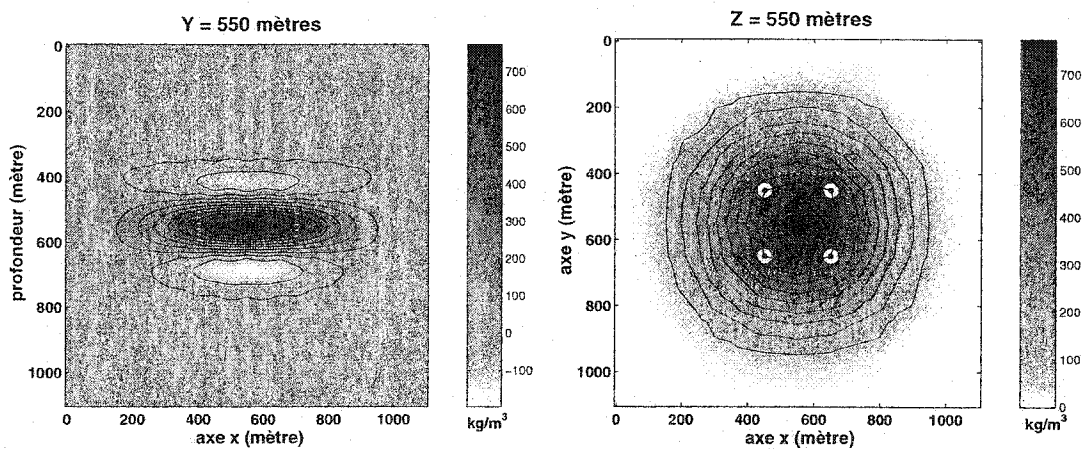
(b) Résultat de l'inversion en coupe Y=550 m.

(c) Résultat de l'inversion en plan Z=550 m.

Figure 4.3: Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages situés à 283 mètres du centre de la plaque.



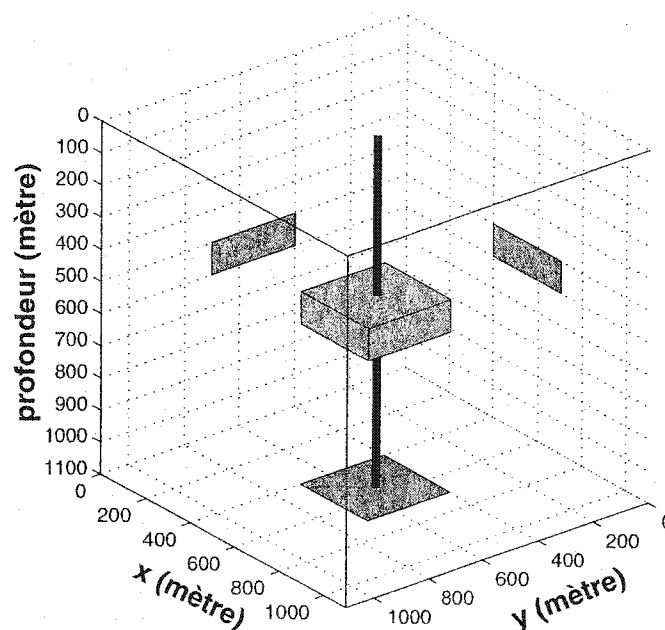
(a) Modèle avec position des forages en traits noirs



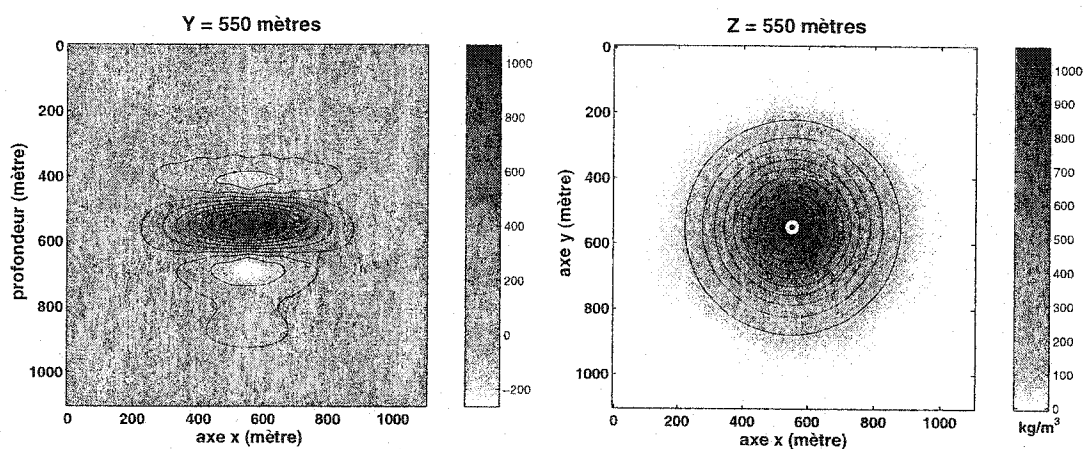
(b) Résultat de l'inversion en coupe verticale en $y=550$ m.

(c) Résultat de l'inversion en plan horizontal en $z=550$ m.

Figure 4.4: Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec forages interceptant la plaque



(a) Modèle avec position du forage en trait noir



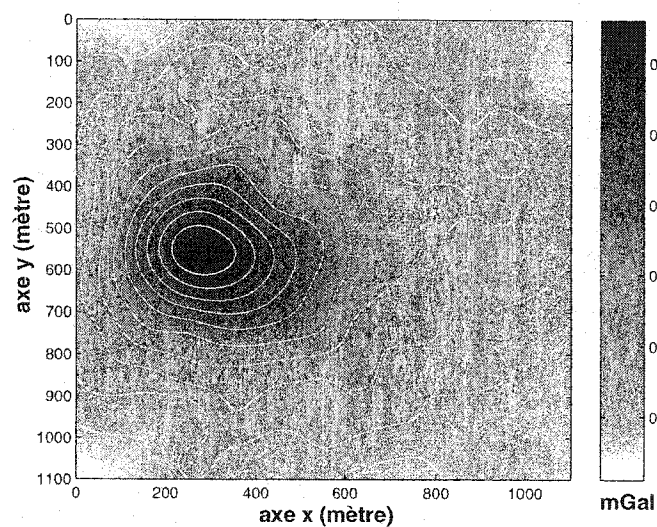
(b) Résultat de l'inversion en coupe verticale en $y=550$ m.

(c) Résultat de l'inversion en plan horizontal en $z=550$ m.

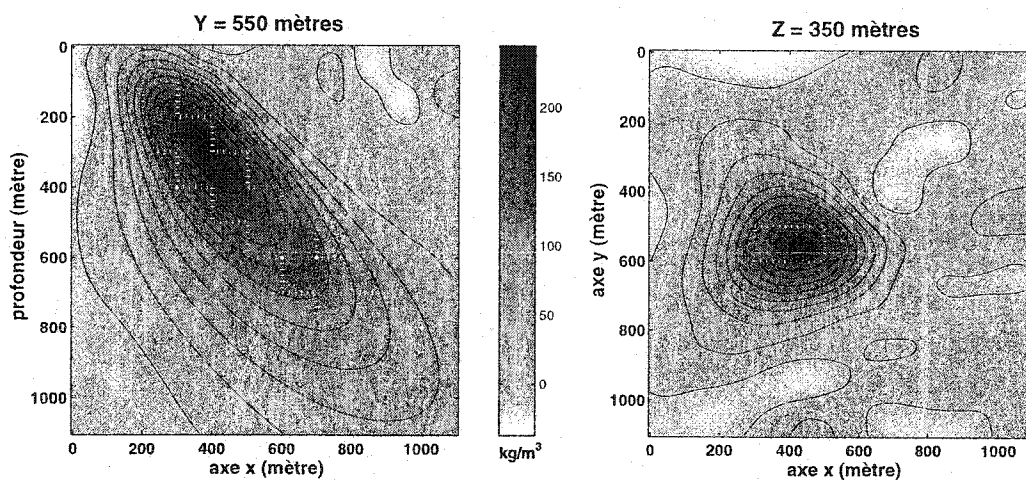
Figure 4.5: Résultats de l'inversion : Modèle de plaque avec un forage passant au centre de la plaque

4.2 à propos de bruit

Nous avons, jusque là, établi et analysé des cas synthétiques sans bruit affectant les données. En effet, après avoir construit un modèle de densité, nous générons des données synthétiques qui sont la réponse parfaite de ce modèle. Essayons maintenant d'intégrer des perturbations à ces données. Pour ce faire, on peut, par exemple, choisir un bruit d'allure gaussienne. Dans ce cas, on ajuste un certain pourcentage de la variance des données à une distribution gaussienne de moyenne 0 et de variance égale à 1. Reprenons le modèle du dyke incliné présenté au chapitre précédent. La figure (4.6 a) représente l'anomalie modélisée et interpolée du dyke à laquelle on a ajouté 5 % de la variance des données ($0.0143 (mGal)^2$) multipliée par une distribution gaussienne. Ceci donne des erreurs incorporées dans les données comprises entre -0.07 et 0.07 mGal pour des données variant entre 0.07 et 0.68 mGal. Le résultat de l'inversion faite à partir de cette anomalie est montré sous forme d'un profil (figure 4.6 b) selon l'axe du dyke ($y=550$ mètres) et selon un plan horizontal (figure 4.6 c) coupant le dyke en $z=350$ mètres. On retrouve la forme du dyke. Il apparaît néanmoins des contrastes de densités négatifs au dessus du dyke, induits par les faibles valeurs de l'anomalie bruitée.



(a) Anomalie du dyke incliné avec bruit gaussien (5% de de la variance des données)



(b) Résultats en section passant par le dyke en $y=550$ mètres. Le modèle est représenté en tiret blanc.

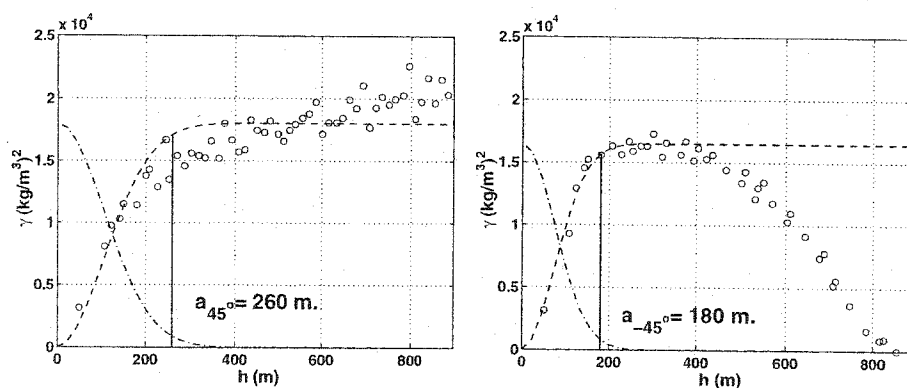
(c) Résultats en plan horizontal en $z=350$ mètres. Le modèle est représenté en tiret blanc.

Figure 4.6: Résultats de l'inversion du dyke incliné avec ajout de bruit gaussien sur les données

4.3 à propos de covariance

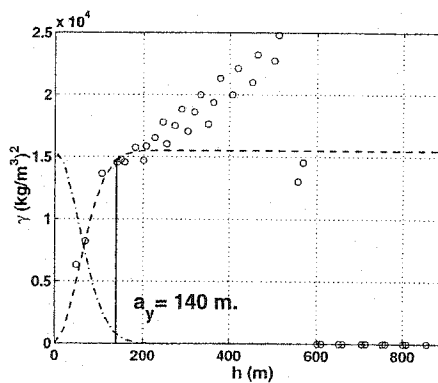
Le choix du modèle de covariance influence fortement les résultats de l'inversion. Le choix dans la modélisation des variogrammes expérimentaux concernant le dyke incliné peut s'avérer subjectif et donc différent d'un utilisateur à l'autre. En effet, les variogrammes en figure (4.7) sont ajustés par un modèle gaussien. Les portées du modèle ne rendent pas compte de l'anisotropie du dyke (portée de 260 mètres selon la direction du dyke). De ce fait, les résultats de l'inversion en figure (4.8) montrent une distribution de densité peu représentative de l'allongement du dyke. La même observation peut se faire lorsqu'on ajuste un modèle de type sphérique sur les variogrammes expérimentaux du dyke synthétique (figure (4.9)). La faible portée selon le dyke induit également une distribution non représentative de l'allongement du dyke (figure (4.10)).

Dans la même optique, en considérant un modèle de covariance erroné par rapport à la distribution réelle de densité, l'inversion ne donnera pas un bon résultat, malgré l'ajustement des données. Prenons par exemple un modèle de covariance exponentiel avec une portée maximale de 700 mètres selon la direction perpendiculaire à l'allongement du dyke réel (les portées selon les deux autres directions étant fixées à 200 m.). La solution à partir de ce modèle (figure (4.11)) est influencée par ce modèle de covariance. On trouve une distribution relativement isotrope : si l'on calcule les variogrammes expérimentaux (figure 4.12), les portées ne reflètent pas l'anisotropie choisie initialement. Ce qui n'est pas le cas lorsque le modèle de covariance initial est approprié (figure 3.6).



(a) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction du dyke. Modèle gaussien

(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction perpendiculaire au dyke et à l'axe y. Modèle gaussien



(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction de l'axe principal y. Modèle gaussien

Figure 4.7: Dyke synthétique incliné : variogrammes expérimentaux ajustés par un modèle gaussien et covariogrammes correspondants

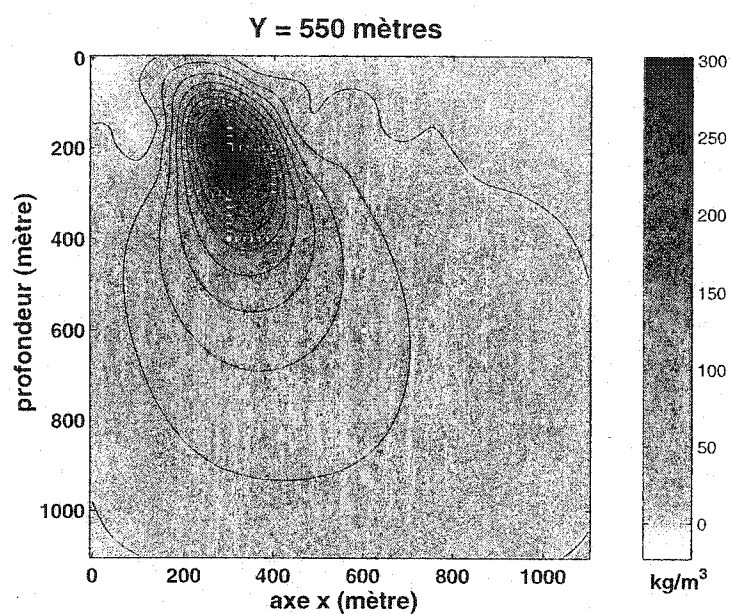
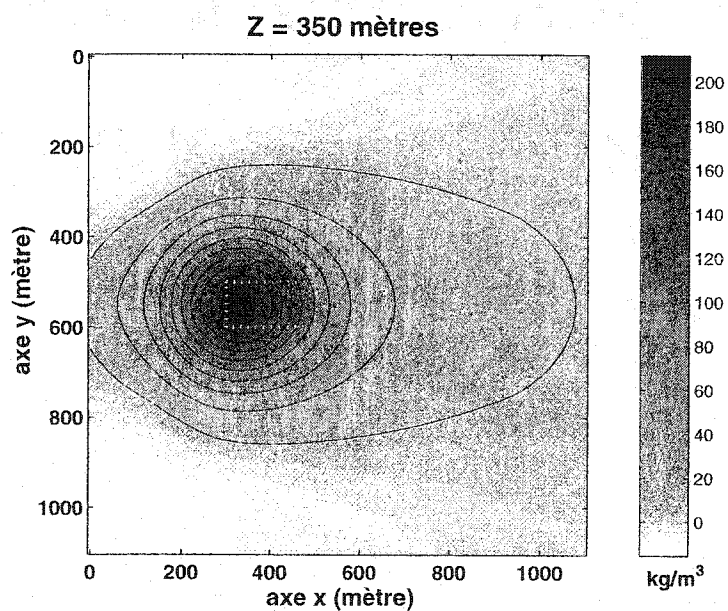
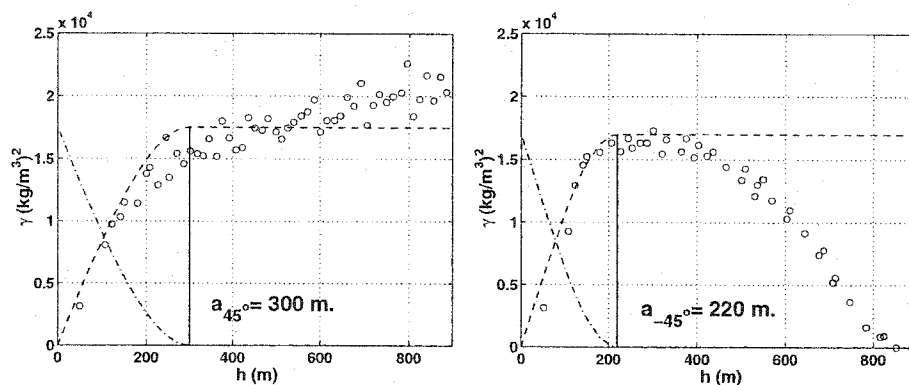
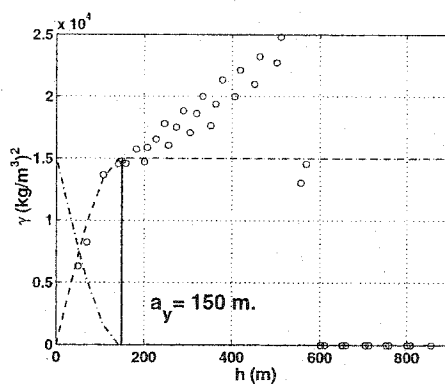
(a) Coupe verticale en $y=550$ mètres(b) Section horizontale en $z=350$ mètres

Figure 4.8: Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance gaussien. Le modèle est représenté en tiret blanc.



(a) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction du dyke. Modèle sphérique

(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction perpendiculaire au dyke et à l'axe y. Modèle sphérique



(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction de l'axe principal y. Modèle sphérique

Figure 4.9: Dyke synthétique incliné : variogrammes expérimentaux ajustés par un modèle sphérique et covariogrammes correspondants

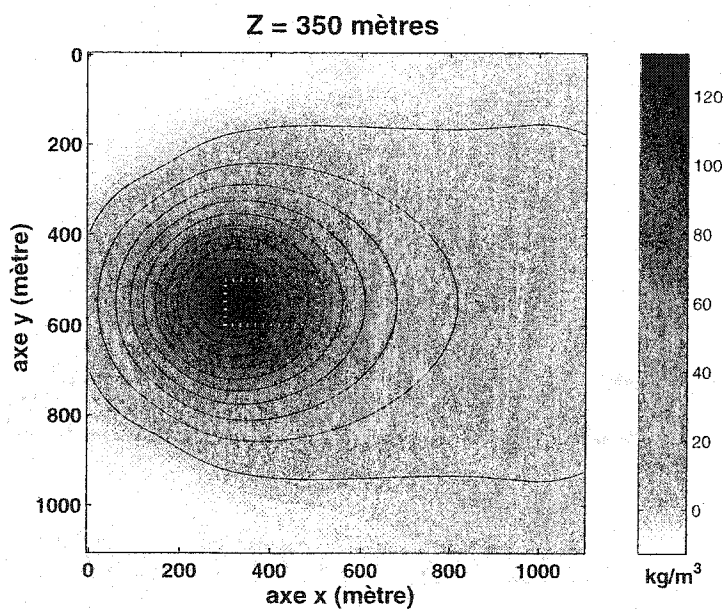
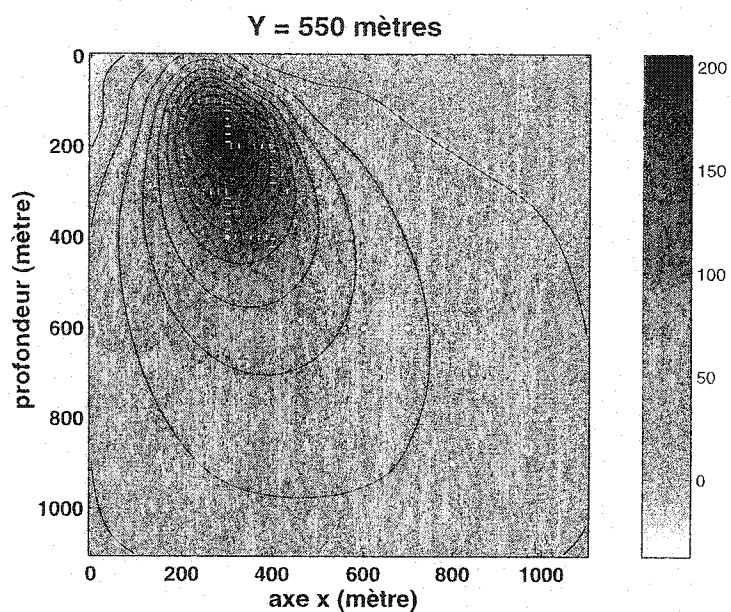


Figure 4.10: Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance sphérique. Le modèle est représenté en tiret blanc.

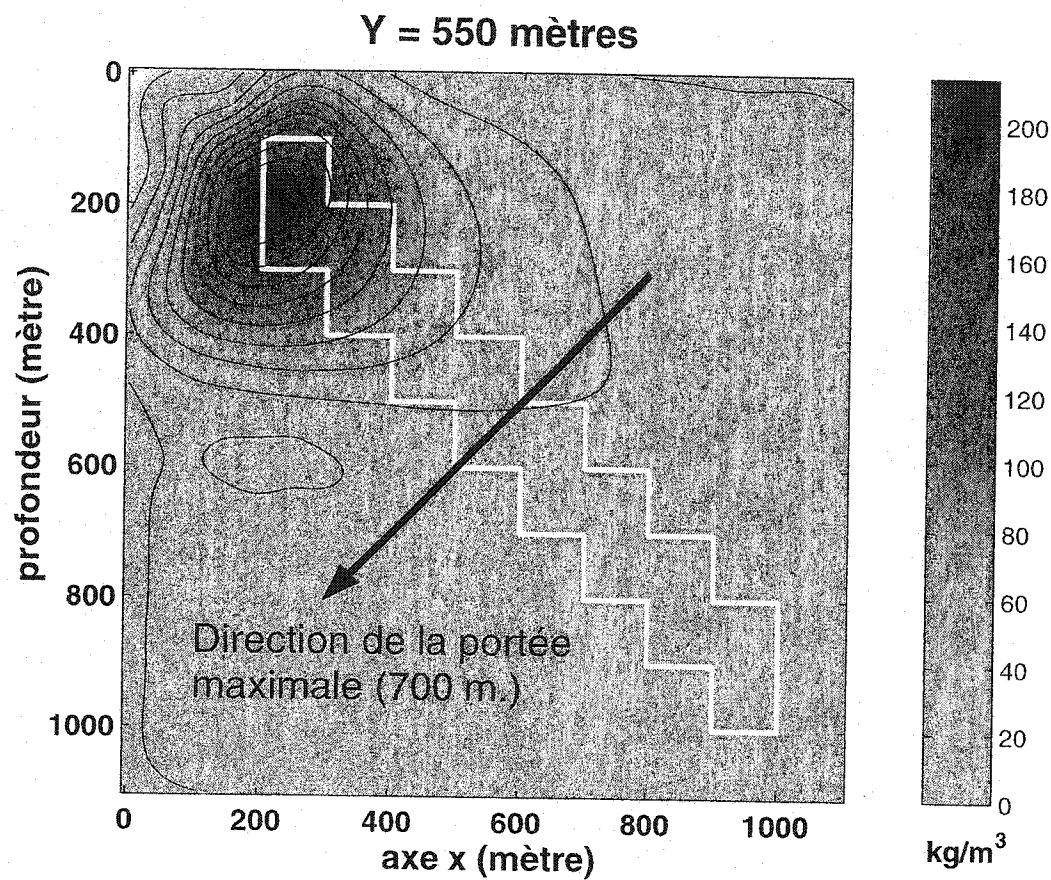
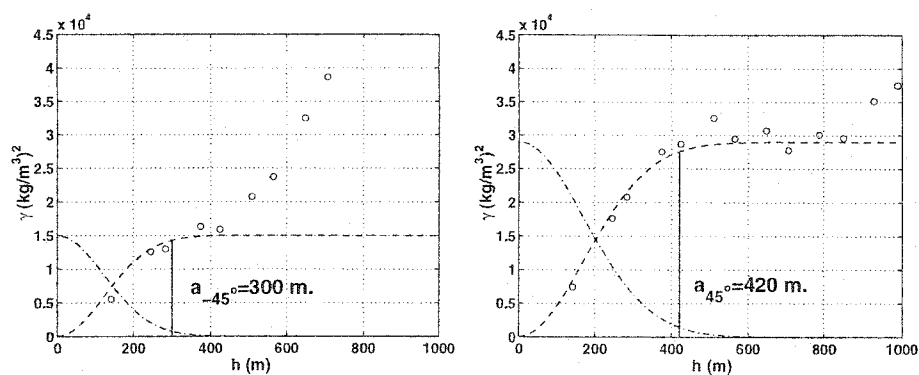
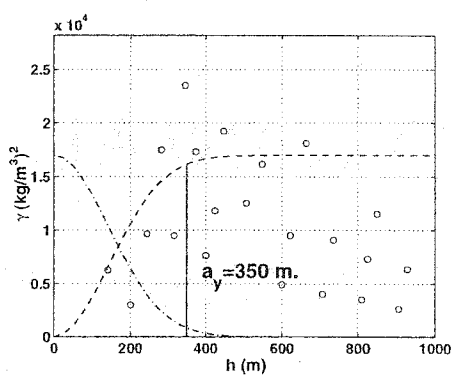


Figure 4.11: Résultat de l'inversion du dyke incliné avec un modèle de covariance erroné dont la portée maximale est perpendiculaire à l'allongement du dyke



(a) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction du dyke

(b) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon la direction perpendiculaire au dyke



(c) Variogramme (—) et covariogramme (---) selon l'axe y

Figure 4.12: Variogramme (—) et covariogramme (---) des densités obtenues à partir d'un modèle initial de covariance erroné (figure 4.11)

4.4 à propos de modèle initial

Dans le chapitre précédent, nous avons testé la reconstruction du modèle de dyke à partir d'un modèle initial différent d'un modèle homogène de contraste de densité nul. L'inversion donnait de bons résultats car le modèle initial (un prisme en surface) était très éloigné du modèle du dyke incliné. Considérons maintenant un modèle initial à priori s'ajustant mieux aux données synthétiques créées à partir du dyke incliné. La figure (4.13) représente ce modèle initial correspondant à un dyke vertical positionné à l'aplomb du point de coordonnées $x=250$ mètres et $y=550$ mètres. Ce dyke a une extension latérale de 100×100 mètres et une extension verticale de 300 mètres, comprise entre 350 et 550 mètres de profondeur. L'inversion est effectuée avec une contrainte de positivité sur les densités et un modèle de covariance correct (anisotropie selon le dyke incliné). Le résultat donne une distribution proche du modèle initial (figure (4.14)) avec un corps peu dense s'orientant dans la direction du modèle réel (dyke à 45°). L'erreur moyenne est de 1.9 %. Ces résultats montrent que l'influence des covariances des paramètres reste moindre par rapport à l'ajustement des données. Il conviendrait, dans ces conditions, d'utiliser un modèle initial non homogène seulement lorsqu'on est sûr de sa justesse .

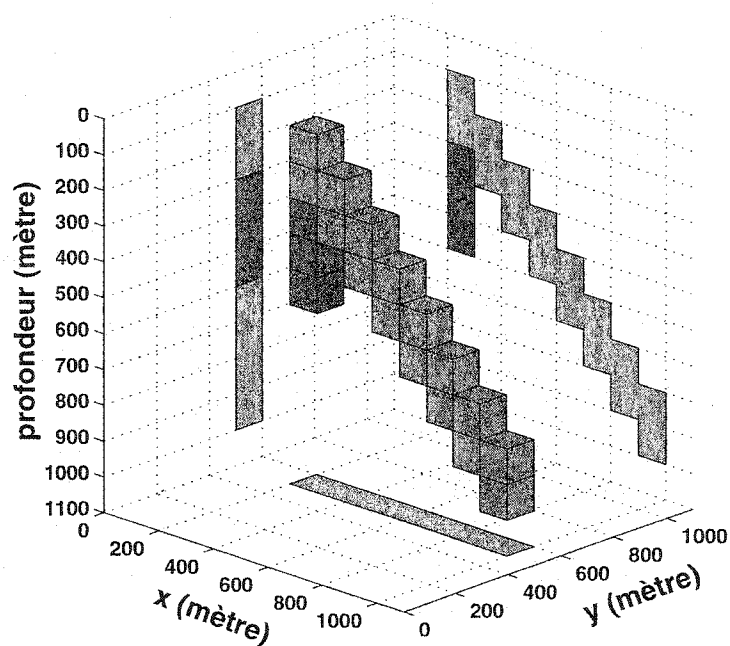


Figure 4.13: Modèle de dyke synthétique (en gris clair) avec modèle initial (en gris foncé)

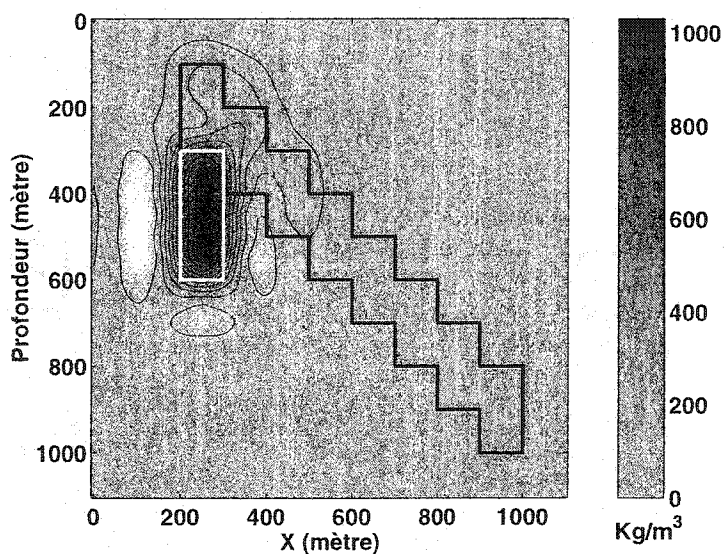


Figure 4.14: Résultat de l'inversion du dyke incliné avec le modèle initial illustré en figure 4.13. La figure représente une coupe verticale en $y=550$ mètres. Le modèle synthétique est représenté en trait noir continu et le modèle initial est représenté en trait blanc continu

Conclusions

Le développement d'un algorithme d'inversion utilisant la covariance des paramètres visait à déterminer les avantages et limites d'une telle méthode. La solution de l'inversion est fortement influencée par le modèle de covariances des paramètres que l'on emploie. Nous avons pu comparer sur un modèle de dyke incliné, les solutions avec et sans utilisations des covariances des densités. Dans le cas où l'on ne tient pas compte d'un modèle de covariance, on ne retrouve ni la forme, ni le pendage, ni le contraste de densité du dyke. Dans le cas où l'on introduit un modèle de covariance, la forme du dyke est bien retrouvée. Bien que l'algorithme établisse une concordance parfaite entre les réponses calculées et les observations, ce à quoi on peut s'attendre dans le cas de problème sous-déterminé, l'utilisation d'un modèle de covariance erroné produira une solution erronée. L'utilisation de la covariance des paramètres ne permet pas de retrouver une bonne résolution de la densité en profondeur. En effet, la difficulté majeure en inversion gravimétrique vient du fait que la sensibilité du champ décroît très vite avec la distance. Par conséquent, la densité en profondeur devient difficile à estimer. Il est alors indispensable d'utiliser un système de pondération des cellules en fonction de leur profondeur.

Les principales limites de l'algorithme sont le temps de calcul et le stockage de la matrice de covariance qui, pour une grande discrétisation d'un domaine, peuvent être énormes. L'algorithme ayant été développé en langage MATLAB, il était inévitable de stocker toute la matrice de covariance pour pouvoir effectuer des produits ma-

triciels. En effet, on a préféré privilégier le temps de calcul au détriment de l'espace de stockage. Ainsi, la dimension maximale de discrétisation d'un domaine 3D est d'environ 3000 cellules.

Un problème également rencontré concernait l'ajustement des variogrammes expérimentaux nécessaire pour l'estimation d'un modèle de covariance. En effet, la fiabilité des variogrammes dépend entre autres du nombre d'échantillons de densité disponibles, du choix du pas d'échantillonnage, des dimensions du domaine d'inversion. Tout ces paramètres, qu'ils soient subjectifs ou bien dictés par les contraintes du terrain sont autant de paramètres affectant l'ajustement d'un modèle de covariance. De plus, le modèle de covariance qui se définit par une ellipsoïde d'anisotropie est une projection en surface du véritable modèle tridimensionnel qui lui, reste inconnu, à moins de disposer d'un nombre considérable de forages. De ce fait, l'anisotropie réelle est sous estimée.

Nous avons également pu estimer la contribution de données gravimétriques prises le long de forages. Le modèle de la plaque horizontale est un cas où seules les données de surface ne suffisent pas à obtenir une bonne résolution du modèle de plaque. Les données de forage permettent de mieux localiser le corps, de mieux restituer sa forme et son contraste de densité.

Références

- ASLI, M., MARCOTTE, D. et CHOUTEAU, M. (2000). Direct inversion of gravity data by cokriging. Dans *Geostat2000*, Cape Town, South Africa.
- BARBOSA, V., SILVA, J. et MEDEIROS, W. (1999). Stable inversion of gravity anomalies of sedimentary basins with nonsmooth basement reliefs and arbitrary density contrast variations. *Geophysics*, 64, 754–764.
- BELLEFLEUR, G. (1992). Contribution des méthodes de potentiel à la cartographie géologique et à la structure profonde dans le groupe de Blake River, Abitibi. Mémoire de maîtrise, Ecole Polytechnique de Montréal.
- BLAKELY, R. (1995). Potential theory in gravity and magnetic applications. *Cambridge University Press*.
- BOULANGER, O. et CHOUTEAU, M. (2001). Constraints in 3D gravity inversion. *Geophysical Prospecting*, 49, 265–280.
- BRAILLE, L., KELLER, G. et PEEPLES, W. (1974). Inversion of gravity data for two-dimensional density distribution. *J. Geophys. Res.*, 79, 2017–2021.
- DAVID, M. (1977). geostatistical ore reserve estimation. *Elsevier Scientific Pub. Co*, 364 p.

- DESCHAMPS, F., CHOUTEAU, M. et DION, D.-J. (1996). Interprétation des données aéromagnétiques et gravimétriques de la région située à l'ouest de Rouyn-Noranda. Dans *Etudes géophysiques récentes de certains secteurs de la ceinture volcanosédimentaire de l'Abitibi*, Édité par M. Germain, volume DV 93-10, Ministère des ressources naturelles. Secteur des mines, 78-130.
- DEUTSCH, C. V. et JOURNAL, A. G. (1992). Geostatistical Software Library and User's Guide. *Oxford University Press*.
- DJERIDANE, S. (1996). Inversion gravimétrique bidimensionnelle minimisant les structures du sous-sol : application aux sous-provinces de l'Abitibi et de l'Opatika. Mémoire de maîtrise, Ecole Polytechnique de Montréal.
- FEDI, M. et RAPOLLA, A. (1999). 3-D inversion of gravity and magnetic data with depth resolution. *Geophysics*, 64, 452-460.
- GREEN, W. (1975). Inversion of gravity profiles by use of a Backus-Gilbert approach. *Geophysics*, 40, 763-772.
- GUILLEN, A. et MENICHETTI, V. (1984). Gravity and magnetic inversion with minimization of a specific functional. *Geophysics*, 1354-1360.
- ISAAKS, E. et SRIVASTAVA, M. (1989). An introduction to applied geostatistics. Oxford University press.
- KEATING, P. (1996). Interprétation des anomalies gravimétriques dans la région de Rouyn-Noranda, Val d'Or. Dans *Etudes géophysiques récentes de certains secteurs de la ceinture volcanosédimentaire de l'Abitibi*, Édité par M. Germain, volume DV 93-10, Ministère des ressources naturelles. Secteur des mines, 57-76.
- LAST, B. et KUBIK, K. (1983). Compact gravity inversion. *Geophysics*, 48, 713-721.

- LEE, T.-C. et BIEHLER, S. (1991). Inversion modeling of gravity with prismatic mass bodies. *Geophysics*, 56, 1365–1376.
- LEITE, W. et LEÃO, J. (1985). Ridge regression applied to the inversion of two-dimensional aeromagnetic anomalies. *Geophysics*, 50, 1294–1306.
- LI, Y. et OLDENBURG, D. (1997). Fast inversion of large scale magnetic data using wavelets. 67th Ann. Internat. Mtg., Society of Exploration Geophysics, 490–493.
- LI, Y. et OLDENBURG, D. (1998). 3-D inversion of gravity data. *Geophysics*, 63, 109–119.
- LINES, L. et TREITEL, S. (1984). A review of least-squares inversion and its application to geophysical problems. *Geophysical Prospecting*, 159–186.
- MARCOTTE, D. (1996). Cours de géologie minière 7.420 (partie géostatistique). Ecole Polytechnique de Montréal.
- MARQUARDT, D. (1970). Generalized inverses, ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation. *Technometrics*, 12.
- MATHERON, G. (1965). Les variables régionalisées et leur estimation, une application de la théorie des fonctions aléatoires aux sciences de la nature. Masson, Paris.
- MATHERON, G. (1969). Cours de géostatistiques. Les cahiers du centre de morphologie mathématique de Fontainebleau, fascicule 2, école nationale supérieure des mines de paris édition.
- MEJU, M. (1994). Geophysical Data Analysis : Understanding Inverse Problem Theory and Practice, volume 6. Society of Exploration Geophysicists, course notes series. s.n. domenico édition.

- MEJU, M. et HUTTON, V. (1992). Iterative most-squares inversion : application to magnetotelluric data. *Geophys. J. Int.*, 108, 758-766.
- MENKE, W. (1984). Geophysical data analysis : discrete inverse theory. Orlando, Fla : Academic Press.
- MONTAGNER, J.-P. et JOBERT, N. (1988). Vectorial tomography-II. Application to the Indian Ocean. *Geophys. J. Roy. Astr. Soc.*, 94, 309-344.
- NAGY, D. (1966). The gravitational attraction of a right rectangular prism. *Geophysics*, 31, 362-371.
- OLDENBURG, D. (1974). The inversion and interpretation of gravity anomalies. *Geophysics*, 39, 526-536.
- PERRON, G. et CALVERT, A. (1998). Case History : Shallow, high-resolution seismic imaging at the Ansil mining camp in the Abitibi greenstone belt. *Geophysics*, 63, 379-391.
- PILKINGTON, M. (1997). 3-D magnetic imaging using conjugate gradients. *Geophysics*, 62, 1132-1142.
- PILKINGTON, M. et TODOESCHUCK, J. (1991). Naturally smooth inversions with a priori information from well logs. *Geophysics*, 56, 1811-1818.
- PILKINGTON, M. et TODOESCHUCK, J. (1992). Natural smoothness constraints in cross-hole seismic tomography. *Geophysical Prospecting*, 40, 227-242.
- SAFAI NARAGHI, K. (1996). L'estimation des intervalles de confiance des paramètres du variogramme et son application dans la simulation des variables régionalisées. Thèse de Doctorat, Ecole Polytechnique de Montréal.

- SEN, M. et STOFFA, P. (1995). Global Optimization Methods in Geophysical Inversion. Elsevier, a.j. berkhouit édition.
- SIMARD, R. (1980). Etude de la représentativité des levés gravimétriques et de son influence sur l'interprétation. Thèse de Doctorat, Université de Lausanne.
- TARANTOLA, A. et VALETTE, B. (1982). Generalized nonlinear inverse problems solved using the least squares criterion. *Review of Geophysics and Space Physics*, 20, 219-232.
- VERPAELST, P., PELOQUIN, A., ADAM, E., BARNES, A., LUDDEN, J., DION, D.-J., HUBERT, C., MILKEREIT, B. et LABRIE, M. (1995). Seismic reflection profiles across the "Mine Series" in the Noranda camp of the Abitibi belt, eastern Canada. *Can. J. Earth Sci.*, 32, 167-176.
- YANG, X. et LABRECQUE, D. (1998). Stochastic inversion of 3D ERT data. Dans *SAGEEP 98*, Chicago, Illinois, 221-228.

Annexe A

Expression de la minimisation de la fonction objective

$$\begin{aligned}\Phi &= (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0))^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)) \\ &\quad + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{W}_z^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W}_z (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)\end{aligned}$$

La minimisation de Φ implique que $\partial\Phi/\partial\mathbf{m} = 0$:

$$\begin{aligned}\Rightarrow & \underbrace{-\mathbf{A}^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0))}_{(a)} - \underbrace{(\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0))^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{A}}_{(b)} \\ & \quad + \underbrace{\mathbf{W}^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)}_{(a)} + \underbrace{(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{W}^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W}}_{(b)} = 0\end{aligned}$$

Si n est le nombre d'observations et p le nombre de paramètres, les dimensions des vecteurs sont les suivantes : $\mathbf{d} = [n, 1]$, $\mathbf{m} = [p, 1]$, $\mathbf{A} = [n, p]$, $\mathbf{C}_d = [n, n]$, $\mathbf{C}_p = [p, p]$ et $\mathbf{W} = [p, p]$. Ainsi, les termes notés (a) sont de dimensions $[p, 1]$ et les termes notés (b) sont de dimensions $[1, p]$. On a le système suivant :

$$\Rightarrow \begin{cases} -\mathbf{A}^T \mathbf{C}_d^{-1} (\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)) + \mathbf{W}^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W} (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0) &= 0 \\ -(\mathbf{d} - \mathbf{f}(\mathbf{m}_0) - \mathbf{A}(\mathbf{m} - \mathbf{m}_0))^T \mathbf{C}_d^{-1} \mathbf{A} + (\mathbf{m} - \mathbf{m}_0)^T \mathbf{W}^T \mathbf{C}_p^{-1} \mathbf{W} &= 0 \end{cases}$$

Les deux équations précédentes sont équivalentes.

$$\begin{aligned} -A^T C_d^{-1}(d - f(m_0) - A(m - m_0)) + W^T C_p^{-1} W(m - m_0) &= 0 \\ (A^T C_d^{-1} A + W^T C_p^{-1} W)(m - m_0) &= A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \end{aligned}$$

Étant donné que le terme de gauche est une matrice carrée $[p, p]$, on peut écrire :

$$\begin{aligned} m - m_0 &= (A^T C_d^{-1} A + W^T C_p^{-1} W)^{-1} A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= (W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d)(W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d)^{-1} (A^T C_d^{-1} A + W^T C_p^{-1} W)^{-1} \dots \\ &\quad \dots A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d ((A^T C_d^{-1} A + W^T C_p^{-1} W)(W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d))^{-1} \dots \\ &\quad \dots A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d (A^T C_d^{-1} A W^{-1} C_p W^{-1} A^T C_d + A^T C_d)^{-1} \dots \\ &\quad \dots A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= W^{-1} C_p W^{-1} A^T (A^T C_d^{-1} A W^{-1} C_p W^{-1} A^T + A^T)^{-1} A^T C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= W^{-1} C_p W^{-1} A^T (C_d^{-1} A W^{-1} C_p W^{-1} A^T + I)^{-1} C_d^{-1}(d - f(m_0)) \\ &= W^{-1} C_p W^{-1} A^T (A W^{-1} C_p W^{-1} A^T + C_d)^{-1}(d - f(m_0)) \end{aligned}$$

On retrouve la relation 1.17

$$m = m_0 + W^{-1} C_p W^{-1} A^T (A W^{-1} C_p W^{-1} A^T + C_d)^{-1}(d - f(m_0))$$

Annexe B

Expression du champ de gravité pour un prisme rectangulaire

Soit un prisme élémentaire (figure A.2) de densité ρ , on calcule le champ de gravité due au prisme au point $P(x, y, z)$ de la manière suivante. On pose :

$$dx_1 = x_1 - x \quad dx_2 = x_2 - x$$

$$dy_1 = y_1 - y \quad dy_2 = y_2 - y$$

$$dz_1 = z_1 - z \quad dz_2 = z_2 - z$$

On a les distances suivantes :

$$r_{222} = \sqrt{dx_2^2 + dy_2^2 + dz_2^2} \quad r_{221} = \sqrt{dx_2^2 + dy_2^2 + dz_1^2}$$

$$r_{212} = \sqrt{dx_2^2 + dy_1^2 + dz_2^2} \quad r_{211} = \sqrt{dx_2^2 + dy_1^2 + dz_1^2}$$

$$r_{122} = \sqrt{dx_1^2 + dy_2^2 + dz_2^2} \quad r_{121} = \sqrt{dx_1^2 + dy_2^2 + dz_1^2}$$

$$r_{112} = \sqrt{dx_1^2 + dy_1^2 + dz_2^2} \quad r_{111} = \sqrt{dx_1^2 + dy_1^2 + dz_1^2}$$

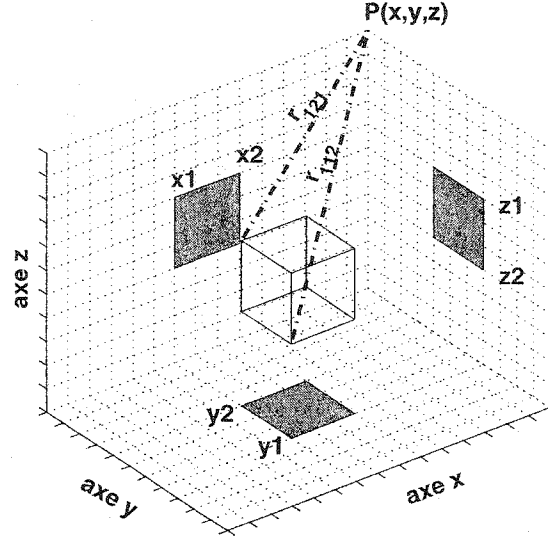


Figure A.2: Discretisation 3D avec prisme élémentaire

Selon la formulation d'Haaz (1953), le champ g_z s'exprime comme suit :

$$\begin{aligned}
 g_z/(G\rho) = & dx_2 \ln(R_1) - dx_1 \ln(R_2) + dy_2 \ln(R_3) - dy_1 \ln(R_4) \\
 & + dz_2 [\arctan(a_{222}) + \arctan(a_{112}) - \arctan(a_{212}) - \arctan(a_{122})] \\
 & - dz_1 [\arctan(a_{221}) + \arctan(a_{111}) - \arctan(a_{211}) - \arctan(a_{121})]
 \end{aligned}$$

avec les termes suivants :

$$\begin{aligned}
 R_1 &= \frac{(dy_2 + r_{221}) \times (dy_1 + r_{212})}{(dy_2 + r_{222}) \times (dy_1 + r_{211})} & R_2 &= \frac{(dy_2 + r_{121}) \times (dy_1 + r_{112})}{(dy_2 + r_{122}) \times (dy_1 + r_{111})} \\
 R_3 &= \frac{(dx_2 + r_{221}) \times (dx_1 + r_{122})}{(dx_2 + r_{222}) \times (dx_1 + r_{121})} & R_4 &= \frac{(dx_2 + r_{211}) \times (dx_1 + r_{112})}{(dx_2 + r_{212}) \times (dx_1 + r_{111})}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 a_{222} &= (dx_2 \times dy_2)/(dz_2 \times r_{222}) & a_{112} &= (dx_1 \times dy_1)/(dz_2 \times r_{112}) \\
 a_{212} &= (dx_2 \times dy_1)/(dz_2 \times r_{212}) & a_{122} &= (dx_1 \times dy_2)/(dz_2 \times r_{122}) \\
 a_{221} &= (dx_2 \times dy_2)/(dz_1 \times r_{221}) & a_{111} &= (dx_1 \times dy_1)/(dz_1 \times r_{111}) \\
 a_{211} &= (dx_2 \times dy_1)/(dz_1 \times r_{211}) & a_{121} &= (dx_1 \times dy_2)/(dz_1 \times r_{121})
 \end{aligned}$$